



TAMPEREEN TEKNILLINEN YLIOPISTO  
TAMPERE UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

**HARRI MÄNTYLÄ**  
**NANOHIUKKASTEN LINEAARISEN OPTISEN VASTEEN**  
**MALLINNUS ELEMENTTIMENETELMÄLLÄ**

Diplomityö

Tarkastajat: Tekniikan tohtori Jouni  
Mäkitalo, Professori Martti Kauranen  
Tarkastajat ja aihe hyväksytty  
luonnontieteiden  
tiedekuntaneuvoston kokouksessa  
12. elokuuta 2015

# TIIVISTELMÄ

TAMPEREEN TEKNILLINEN YLIOPISTO

Teknis-luonnontieteellinen koulutusohjelma

**MÄNTYLÄ, HARRI: Nanohiukkasten lineaarisen optisen vasteen mallinnus elementtimenetelmällä**

Diplomityö, 66 sivua, 15 liitesivua

Lokakuu 2015

Pääaine: Teknillinen fysiikka

Tarkastajat: tekniikan tohtori Jouni Mäkitalo, professori Martti Kauranen

Avainsanat: sironta, nanohiukkaset, substraatti, elementtimenetelmä

Valon ja nanoluokan rakenteiden vuorovaikutusta tutkiva nano-optiikka on tullut viime vuosina tärkeäksi erilaisten nanolitografisten menetelmien kehityttyä, mikä on mahdollistanut erikokoisten ja -muotoisten nanohiukkasten ja -rakenteiden valmistamisen. Tällaisissa rakenteissa saadaan aikaan voimakas sähkökentän paikallinen vahvistus, mistä on hyötyä monissa sovelluksissa. Nanorakenteiden optisten ominaisuuksien ennustamiseksi pitää ratkaista sähkömagneettinen sirontatehtävä numeerisesti nanorakenteissa ja niiden ympärillä.

Tässä työssä tarkastellaan sähkömagneettista sirontaa hiukkasista, jotka on tehty isotrooppisesta materiaalista. Tätä varten johdetaan Maxwellin yhtälöiden perusteella sirontatehtävä, jonka ratkaisuna saadaan sähkö- ja magneettikenttä määritellyalueessa. Tämän jälkeen sirontatehtävä ratkaistaan likiarvoisesti aikaharmonisen kentän tapauksessa käyttäen elementtimenetelmää, jonka tarkkuuteen vaikuttavia tekijöitä, kuten kantafunktioiden ja reunaehdon valintaa, tarkastellaan. Mallinnusohjelmana käytetään Comsolia.

Herätteenä käytetään tasoaallon lisäksi fokusoituja säteitä, jotka saadaan, kun laserista saatu heräte fokusoidaan linssin avulla. Tarkastelussa painotetaan laser säteiden vektoriaalisia poikittaismuotoja, joissa sähkökentän suuntavektorit riippuvat paikasta. Radiaalisesti polarisoituneessa poikittaismuodossa suuntavektorit ovat symmetrisiä säteen keskipisteen suhteen. Atsimutaalisesti polarisoituneessa poikittaismuodossa suuntavektorit ovat kohtisuorassa poikittaisleikkauksen radiaalisen yksikkövektorin kanssa. Fokusoidut säteet ovat tärkeitä muun muassa epälineaarisen vasteen kannalta.

Tulosten laskennassa tarkastellaan sirottajan tuottamia lähi- ja kaukokenttiä sekä vuorovaikutusaloja pallon sekä nanolangan tapauksissa. Pallon tapauksessa tuloksia verrataan analyttiseen Mie-teorian ja reunaelementtimenetelmän tuloksiin, ja huomataan, että elementtimenetelmä johtaa tarkkoihin tuloksiin. Lisäksi huomataan, miten substraatti vaikuttaa tuloksiin. Nanolangan tapauksessa tarkastellaan eri fokusoitujen säteiden aiheuttamaa sirontaa.

# ABSTRACT

TAMPERE UNIVERSITY OF TECHNOLOGY

Master's Degree Programme in Science and Engineering

**MÄNTYLÄ, HARRI: Modelling Linear Optical Response of Nanoparticles Using Finite Element Method**

Master of Science Thesis, 66 pages, 15 Appendix pages

October 2015

Major: Engineering Physics

Examiners: Dr. Jouni Mäkitalo and Professor Martti Kauranen

Keywords: scattering, nanoparticles, substrate, finite element method

Nano-optics, which studies the interaction between light and nanoscale structures, has become important due to the development of nanolithographical methods which has enabled the fabrication of nanoparticles and -clusters of different shapes and sizes. These clusters give rise to strong enhancement of the local electric field, which is important in many applications. Predicting optical properties of nanoclusters requires an approximate solution to an electromagnetic scattering problem in nanoclusters and their environment.

In this work, electromagnetic scattering from scatterers, which have isotropic material properties, is studied. In order to do this, scattering problem is derived from Maxwell's equations. As a solution we obtain electric and magnetic fields in the computational domain. Finite element method is then applied to obtain an approximate solution to the scattering problem assuming time-harmonic fields. The accuracy of the method influenced by the choice of basis functions and boundary value is studied. The modelling software used is Comsol.

Besides plane wave, we use focused beams as an incident field. These are obtained by focusing laser beams with a lens. We pay special attention to vectorial beams which have the property that the field vectors depend on location. For radially-polarized beams, the field vectors are symmetrical about the center of the beam. For azimuthally-polarized beams, the field vectors are perpendicular with the radial unit vector of the beam.

Computational results for the local and far field and various cross-sections produced by the scatterers are preset for a nanosphere, nanowire and oligomer. For the nanosphere, the results are compared to the results given by the analytical Mie-theory and the boundary-element method, and it is found that the finite-element method leads to accurate results. Moreover, we study the effect of substrate. For the case of nanowire, the scattering of focused vectorial beams is studied.

## ALKUSANAT

Tämä työ tehtiin Tampereen teknillisen yliopiston optiikan laboratoriossa kesän 2015 aikana juuri tekniikan tohtoriksi väitelleen Jouni Mäkitalon ja professori Martti Kaurasen ohjauksessa.

Haluan kiittää ohjaajiani tuesta, jota sain työn tekemiseen. Kommentit auttoivat tekemään työstä täsmällisen. Kiitos myös koko optiikan ryhmälle hyvän ilmapiirin luomisesta.

Tampere 23.9.2015

Harri Mäntylä



# SISÄLTÖ

1. Johdanto . . . . .	1
2. Klassinen sähkömagnetiikka ja sirontatehtävä . . . . .	5
2.1 Maxwellin yhtälöt ja väliainerelaatiot . . . . .	5
2.2 Materiaalimallit . . . . .	6
2.3 Sirontatehtävä . . . . .	8
2.4 Absorptio ja sironta . . . . .	11
2.5 Sironnut kaukokenttä . . . . .	13
3. Fokusoidut säteet . . . . .	18
3.1 Kulmaspektriesitys . . . . .	18
3.2 Gaussiset poikittaismuodot paraksiaaliapproksimaatiossa . . . . .	19
3.3 Poikittaismuotojen fokusointi . . . . .	21
3.4 Fokusointi substraatin lähellä . . . . .	29
4. Sirontatehtävän ratkaisu elementtimenetelmällä . . . . .	33
4.1 Variaatiomenetelmät ja elementtimenetelmä . . . . .	33
4.2 Helmholtzin yhtälön heikko muoto . . . . .	36
4.3 Kantafunktiot . . . . .	40
4.4 Absorboivat reunaehdot . . . . .	41
4.5 Elementtimenetelmän tarkkuus . . . . .	43
4.6 Lineaarisen yhtälöryhmän ratkaiseminen . . . . .	43
5. Tulokset . . . . .	46
5.1 Pallo . . . . .	46
5.2 Nanolanka . . . . .	51
6. Yhteenveto . . . . .	56
Lähteet . . . . .	58
A. Liitteitä . . . . .	67

## SYMBOLIT JA LYHENTEET

$\nabla$	Vektorikentän gradientti
$\nabla \cdot$	Vektorikentän divergenssi
$\nabla \times$	Vektorikentän roottori
$\partial$	Reunaoperaattori
$ \cdot $	2-normi
$\langle \cdot, \cdot \rangle$	Sisätulo
$b$	Elementtimenetelmän lähdevektori
$\tilde{\mathbf{B}}$	Aikariippuva magneettivuontiheys
$\mathbf{B}$	Aikaharmonisen magneettivuontiheyden paikkariippuva osa
$C_a$	Absorption vuorovaikutusala
$C_e$	Ekstinktion vuorovaikutusala
$C_{\text{RCS}}$	Sirontakuvio
$C_s$	Sironnan vuorovaikutusala
$c$	Valonnopeus tyhjiössä
$\mathbb{C}^n$	n-ulotteinen kompleksinen euklidinen avaruus
$\tilde{\mathbf{D}}$	Aikariippuva sähkövuontiheys
$\mathbf{D}$	Aikaharmonisen sähkövuontiheyden paikkariippuva osa
$\delta$	Diracin deltafunktio
$\tilde{\mathbf{E}}$	Aikariippuva sähkökenttä
$\mathbf{E}$	Aikaharmonisen sähkökentän paikkariippuva osa
$\mathbf{E}_{\text{inc}}$	Herätteen sähkökenttä
$\mathbf{E}_s$	Sironnut sähkökenttä
$\epsilon$	Sähköinen permittiivisyys
$f$	Polttoväli

$f_w$	Apodisaatiofunktio
$\gamma$	Vaimennuskerroin
$G$	Skalaarinen Greenin funktio
$\mathbf{G}$	Dyadinen Greenin funktio
$\eta$	Aaltoimpedanssi
$\tilde{\mathbf{H}}$	Aikariippuva magneettikenttä
$\mathbf{H}$	Aikaharmonisen magneettikentän paikkariippuva osa
$\theta$	Korkeuskulma
$\mathbf{H}_{\text{inc}}$	Herätteen magneettikenttä
$\mathbf{H}_s$	Sironnut magneettikenttä
$i$	Imaginääriyksikkö
$I$	Intensiteetti
$J_n$	Asteen $n$ Bessel-funktio
$\mathbf{J}$	Sähköinen virrantiheys
$\mathbf{J}_{\text{ms}}$	Ekvivalentti magneettinen pintavirrantiheys
$\mathbf{J}_s$	Ekvivalentti sähköinen pintavirrantiheys
$k$	Aaltoluku
$K$	Systeemimatriisi
$\lambda$	Aallonpituus tyhjiössä
$\mathbb{L}^2$	Neliöintegroituvien kuvausten Hilbert-avaruus
$\mu$	Magneettinen permeabiliteetti
$n$	Taitekerroin
$\mathbf{n}$	Pinnan normaalivektori
$N_k^{(e)}$	Elementin $e$ solmun $k$ barysentrinen koordinaatti
$\mathbf{N}_{lk}^{(e)}$	Vektoriaalinen ensimmäisen asteen kantafunktio

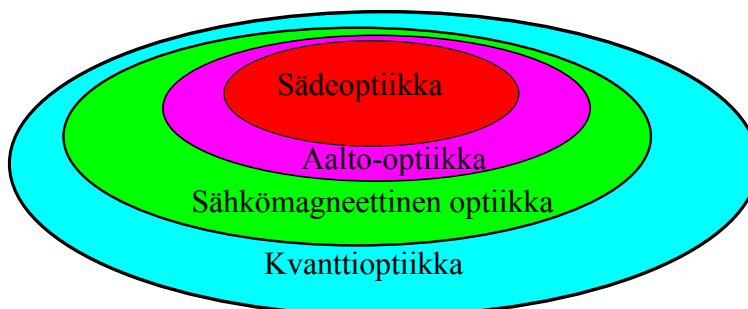
$\rho$	Varaustiheys
$r$	Etäisyys koordinaatiston origosta
$\mathbb{R}^n$	$n$ -ulotteinen reaalinen euklidinen avaruus
<b>S</b>	Poyntingin vektori
$\sigma$	Sähkönjohtavuus
$V$	Sirottava osa tehtäväalueessa
$V_c$	Sirottavan alueen komplementtialue tehtäväalueessa
$W$	Teho
<b>W</b>	Vektoriaalinen testifunktio
$\phi$	Atsimutaalikulma
$\omega$	Kulmataajuus
$\omega_p$	Plasmataajuus
ABC	Absorboiva reunaehto
AP	Atsimutaalinen poikittaismuoto
BEM	Reunaelementtimenetelmä
BiCG	Bikonjugaattimenetelmä
BiCGSTAB	Stabiloitu bikonjugaattimenetelmä
CG	Konjugaattigradienttimenetelmä
FDTD	Aikatason differenssimenetelmä
FE-BI	Yhdistetty elementti-reunaintegraalimenetelmä
FEM	Elementtimenetelmä
GMRES	Yleistetty residuaalin minimointimenetelmä
HG	Hermite–Gaussinen lasersäteen poikittaismuoto
HR	Hybridiradiaalinen poikittaismuoto
LG	Laguerre–Gaussinen lasersäteen poikittaismuoto

NA	Fokusointielementin numeerinen aukko
PML	Perfectly matched layer
QED	Kvanttielektrodynamiikka
RP	Radiaalinen poikittaismuoto
SERS	Pintavahvistettu Raman-sironta
SFG	Summataajuuden generointi
SHG	Toisen harmonisen generointi

# 1. JOHDANTO

James Clerk Maxwell formalisoi klassisen sähkömagneettisen teorian muodon 1800-luvun lopulla [1]. Maxwellin yhtälöt ennustavat sähkö- ja magneettikenttien syntymisen toisistaan, joka johtaa sähkömagneettiseen säteilyyn. Lisäksi ne ennustavat sähkömagneettisen aallon etenemisnopeuden. Heinrich Hertz totesi kokeellisesti sähkömagneettisen säteilyn olemassaolon 1800-luvun lopulla.

Optiikka on fysiikan osa-alue, jossa tarkastellaan sähkömagneettisia aaltoja, joiden aallonpituus on välillä 400-700 nm. Tällä välillä oleva sähkömagneettinen säteily on ihmissilmälle näkyvää valoa, minkä vuoksi optiikkaa kutsutaan myös valo-opiksi. Optiikalla on monia sovelluksia, kuten hologrammit, optiset kuidut, aurinkokennot, ja DVD-soittimet.



**Kuva 1.1:** Kvantti-optiikka selittää kaikki optiikan ilmiöt, mutta tietyissä tilanteissa voidaan käyttää yksinkertaisempia malleja.

Optiikka voidaan luokitella karkeasti geometriseen eli sädeoptiikkaan, aalto-optiikkaan, sähkömagneettiseen optiikkaan sekä kvantti-optiikkaan lähteen [2] mukaan. Sädeoptiikka on yksinkertaisin optiikan malleista. Se kuvaa valoa yksittäisten säteiden avulla. Malli on käyttökelpoinen tilanteissa, joissa kappaleiden mitat ovat paljon suurempia kuin aallonpituus. Tietyissä ilmiöissä, kuten diffraktiossa ja interferenssissä tämä oletus ei ole voimassa, jolloin sädeoptiikka ei tuota todellisuutta vastaavaa ennustusta. Edellä mainittujen ilmiöiden kuvaamiseen tarvitaan aalto-optiikkaa, joka kuvaa valoa skalaarisen aaltoyhtälön toteuttavalla skalaarifunktiolla. Aalto-optiikka ei kuitenkaan onnistu esimerkiksi polarisaatioilmiöiden kuvaamisessa. Näiden ilmiöiden kuvaamiseen tarvitaan sähkömagneettista optiikkaa, joka tar-

kastelee sähkö- ja magneettikenttiä vektorikenttinä, jotka toteuttavat vektoriaalisen aaltoyhtälön. Malli tuottaa esimerkiksi Fresnel-kertoimet, jotka kertovat, miten valo heijastuu ja taittuu kahden aineen rajapinnalla. Tietyissä tilanteissa täytyy käyttää kvanttioptiikkaa, joka huomioi sen, että valo koostuu hiukkasista, joita sanotaan fotoneiksi.

Sironta ja absorptio ovat optiikan ilmiöitä, joissa valo vuorovaikuttaa väliaineen kanssa. Ne voidaan kuvata vielä nanometriluokan rakenteissa sähkömagneettisen lähestymistavan avulla. Kvanttimekaanisen lähestymistavan mukaan sironnassa atomi imee itseensä fotonin tulevasta säteestä ja emittoi fotonin. Emittoitu foton voi periaatteessa lähteä mielivaltaiseen suuntaan, mutta todennäköisyys vaihtelee yleisessä tapauksessa tarkastelusuunnan, atomin sekä tulevan valon polarisaation ja taajuuden mukaan. Sironta voidaan luokitella elastiseen ja epäelastiseen sen mukaan, onko emittoitujen fotonien aallonpituus sama kuin absorboitujen. Esimerkkinä epäelastisesta sironnasta on Raman-sironta, jota voidaan hyödyntää spektroskopiassa tutkimaan aineen rakennetta [3, 4]. Tässä työssä tarkastellaan elastista sirontaa metallisista ja dielektrisistä nanorakenteista. Absorptiossa atomi imee itsensä fotonin ja palautuu termisesti alkuperäiselle tilalle.

Klassisessa teoriassa absorptio ilmaistaan sähköisen permittiivisyyden imaginääriosan avulla. Sironta riippuu sekä permittiivisyyden reaali- että imaginääriosasta. Lisäksi permittiivisyys voi riippua paikasta, jolloin kappale on epähomogeeninen.

Nano-optiikka on optiikan osa-alue, jossa tutkitaan valon ja nanoluokan rakenteiden vuorovaikutusta. Tämän tutkimisesta on tullut viime vuosina mahdollista nanolitografisten menetelmien, kuten elektronisädelitografian (engl. *electron beam lithography*) kehityttyä, mikä on mahdollistanut erikokoisten ja -muotoisten nanohiukasten ja -rakenteiden tarkan valmistamisen. Eräs syy nano-optiikan tutkimiseen on se, että näitä rakenteita räätälöimällä saadaan aikaan voimakas sähkökentän vahvistus tietyillä herätteillä. Varsinkin jalometallien tapauksessa sähkökentän vahvistus on suuri niissä syntyvien koherenttien johde-elektronikaasun värähtelyjen, plasmonien ansiosta. Plasmonien muodostuminen riippuu nanorakenteiden dimensiosta ja muodosta sekä ympäröivästä väliaineesta [5]. Plasmoniresonanssit aiheuttavat myös sironnan ja absorption voimistumisen.

Tarkasteltaessa kokeellisesti nanorakenteista saatavaa vastetta herätteenä toimii laser (engl. *Light Amplification by Stimulated Emission*), joka tuottaa koherenttia valoa [2, 6] stimuloidun emission avulla. Laserin kehittyminen mahdollisti myös epälineaaristen optisten ilmiöiden havaitsemisen vuonna 1961 [7]. Sähkökentän vahvistuminen aiheuttaa epälineaaristen optisten ilmiöiden voimistumista, sillä ne riippuvat kentän korkeammista potensseista. Esimerkkinä tällaisista ilmiöistä ovat toisen harmonisen generointi (engl. *second-harmonic generation*; SHG) ja summataajuuden generointi (engl. *sum-frequency generation*; SFG). Toisen harmonisen generoinnissa

väliaineessa syntyy kaksinkertaisella taajuudella herätteen taajuuteen nähden sähkökenttä. Tämän vuoksi sitä kutsutaan myös taajuudenkahdennukseksi. SHG:n voimakkuus riippuu sähkökentän neliöstä, joten sen saanto lisääntyy plasmoniresonansien lähellä [8–10]. Näiden lisäksi yksinkertaisimpien mallien puitteissa väliaineella täytyy olla epäkeskeissymmetrinen kiderakenne [11]. SHG:tä voi silti muodostua äärellisissä kappaleissa, sillä väliainerajapinta rikkoo symmetrian. Lisäksi valmistuksesta aiheutuvat defektit vaikuttavat signaaliin [12].

Laser tuottaa monenlaisia säteen poikittaismuotoja. Yleisimpiä poikittaismuotoja ovat Gaussiset säteet, joita ova matalimman asteen lisäksi korkeampaa astetta olevat Hermite–Gaussiset ja Laguerre–Gaussiset säteet. Näistä voidaan muodostaa optisten komponenttien avulla räätälöityjä poikittaismuotoja, joista eräs tärkeimmistä on radiaalinen poikittaismuoto [13], jossa lasersäteiden paikallisten kenttävektorien suunnat osoittavat radiaalisen yksikkövektorin suuntaan. Tällaista sädettä fokusoidessa syntyy sähkökentän komponentti, joka osoittaa etenemissuuntaan [14]. Tämä on hyödyllinen esimerkiksi optisissa loukuissa [15] ja SHG:ssä [16].

Optinen mikroskopia on ala, jossa pyritään havaitsemaan pieniä kohteita. Tämä perustuu siihen, että näytettä valaistaan näkyvällä valolla ja läpimennyt tai heijastunut valo havaitaan. Linssien avulla kuvattavasta kohteesta tuotetaan suurennettu kuva, mikä mahdollistaa hyvin pienien kohteiden havaitsemisen. Tavallisessa mikroskopiassa koko näyte valaistaan kerrallaan. Konfokaalimikroskopian periaate on se, että fokusoitu valonsäde skannataan näytteen yli. Konfokaalimikroskopialla on etuna se, että näytteestä saadaan korkealaatuisia kuvia, sillä fokuksen ulkopuolinen, kuvanlaatua heikentävä informaatio on helppo poistaa [17]. Epälineaarinen mikroskopia toimii samalla periaatteella kuin konfokaalimikroskopia sillä erotuksella, että siinä havaitaan sironneen valon sijaan epälineaaristen ilmiöiden synnyttämää valoa.

Sähkömagneettisen aallon sirontaa nanorakenteista voidaan tutkia kokeellisesti, analyyttisesti ja numeerisesti. Numeerisesti sirontaan ja absorption määrittämiseksi täytyy ratkaista reuna-arvotettava, jota sanotaan sirontatehtäväksi. Analyytinen ratkaisu on mahdollista vain geometrisesti yksinkertaisille kappaleille, kuten pallolle, kunhan väliaine on homogeeninen ja isotrooppinen. Gustav Mie esitti 1908, miten valo siroaa pallon muotoisesta kappaleesta [18, 19]. Monimutkaisimmille rakenteille sirontatehtävä täytyy ratkaista numeerisesti, mikä onnistuu nykyisin pöytätietokoneella, kunhan tehtävän dimensio ei ole liian suuri. Tehtävän luonne vaikuttaa siihen, mikä on sopivin numeerinen menetelmä sen ratkaisuun. Esimerkkinä numeerisista menetelmistä sirontatehtävän ratkaisuun ovat muun muassa elementtimenetelmä (engl. *finite element method*; FEM), reunaelementtimenetelmä (engl. *boundary element method*; BEM) [20, 21] sekä aikatazon differenssimenetelmä (engl. *finite-difference time-domain*; FDTD) [22, 23].

Lisäksi sirontatehtävä voidaan ratkaista numeerisesti kvasistaattisesta approksi-



maatio häiriöteorian avulla, kunhan herätteen aallonpituus on huomattavasti suurempi kuin nanorakenteen dimensiot [24]. Tällä tavalla saadaan selville plasmonirakenteiden ominaismuodot herätteestä riippumatta.

Tässä työssä keskitytään sirontatehtävän numeeriseen ratkaisuun käyttäen elementtimenetelmää, joka on yleinen numeerinen menetelmä osittaisdifferentiaaliyhtälöiden ratkaisemiseksi. Menetelmä mahdollistaa likiarvoratkaisun antamalla äärellisdimensioisen muodon reuna-arvotestävistä, jolla on reunaehto yksikäsitteisyyden takaamiseksi. Lopulta ratkaisu saadaan lineaarisesta yhtälöryhmästä. Tämä ratkaisu ei ole yleisessä tapauksessa tarkka, vaan paras mahdollinen valitussa äärellisdimensioisessa avaruudessa. Sirontatehtävässä tällainen on säteilyehto, joka on asymptootinen reunaehto. Ensimmäisen kerran elementtimenetelmää käytettiin 1943 [25]. Sitä käytettiin aluksi mekaniikan ongelmiin. Nykyisin se on levinnyt muillekin fysiikan osa-alueille, kuten virtausoppiin. Sähkömagneetiikassa elementtimenetelmää käytti ensimmäisen kerran Silvester 1969 [26] analysoidessaan sähkömagneettisten aaltojen etenemistä aaltoputkessa. Pian menetelmää käytettiin muissakin sähkömagneetiikan ongelmissa, kuten sähköstatiikan ja magnetostatiikan ongelmissa ja sähkömagneettisessa sironnassa [27]. Myös yhdistettyjä elementti-reunaintegraalimenetelmiä (engl. *finite element boundary integral*; FE-BI) on sovellettu [28]. Myös taajuudenkahdenmista [29], jaksollisia rakenteita [30], epähomogeenisia sirottajia [31], plasmonisia rakenteita [29] ja fokusoidun säteen ja väliaineen vuorovaikutusta [32] mallinnetaan elementtimenetelmällä.

Tässä työssä tutkitaan lineaarista optista sirontaa nanohiukkasista elementtimenetelmällä. Mallinnusohjelmalla toimii Comsol. Herätteenä käytetään tasoaaltoherätteen lisäksi fokusoituja säteitä, jotka ovat tärkeitä muun muassa SHG:n saannon kannalta. Fokusoitujen säteiden lausekkeet muodostetaan käyttäen Matlab-ohjelmaa, ja ne annetaan syötteenä Comsol-ohjelmalle. Toisessa luvussa johdetaan teoria, joka on lineaarisen optiikan perustana. Kolmannessa luvussa johdetaan fokusoitujen säteiden, kuten radiaalisesti ja atsimutaalisesti polarisoituneiden säteiden lausekkeet. Nämä lausekkeet johdetaan myös tapaukselle, jossa fokusoitu säde kohtaa substraatin, jolloin osa säteestä heijastuu ja osa taittuu. Neljännessä luvussa esitetään sirontatehtävän numeerinen ratkaisu elementtimenetelmällä. Viidennessä luvussa esitellään elementtimenetelmällä saatuja tuloksia valituille rakenteiden, kuten pallolle ja nanolangalle. Saatuja tuloksia verrataan reunaelementtimenetelmällä laskettuihin tuloksiin. Kuudennessa luvussa esitetään yhteenveto.

## 2. KLASSINEN SÄHKÖMAGNETIIKKA JA SIRONTEHTÄVÄ

Sähkömagneettinen sironta on moninainen ilmiö, joka johtuu aineen heterogeenisuudesta atomitasolla. Tämän vuoksi kaikki väliaineet tyhjiötä lukuunottamatta sirottavat valoa. Monissa optiikan ilmiöissä, kuten taittumisessa ja heijastumisessa kahden aineen rajapinnalla tai diffraktiossa hilasta kyse on pohjimmiltaan sironnasta. Absorptiossa hiukkaset muuttavat sähkömagneettiseen kenttään varastoitunutta energiaa muihin muotoihin. Klassisesti sähkömagneettista sirontaa ja absorptiota mallinnetaan Maxwellin yhtälöiden avulla.

Tässä luvussa esitetään klassisen sähkömagneetiikan perusteet olettaen lineaarisen ja isotrooppisen materiaalivasteen. Tämän pohjalta johdetaan ääretöndimensioisen sirontatehtävän reuna-arvotekhtävänä. Lisäksi käydään läpi sirontasuureet, joihin luokituvat sirontakuvio sekä absorptio ja sironnan vuorovaikutusalat.

### 2.1 Maxwellin yhtälöt ja väliainerelaatiot

Sirontatehtävän lähtökohtana ovat makroskooppiset Maxwellin yhtälöt, jotka ilmaistaan klassisessa vektorianalyysissä ja differentiaali muodossa seuraavasti [33]:

$$\nabla \times \tilde{\mathbf{E}} = -\frac{\partial \tilde{\mathbf{B}}}{\partial t}, \quad (2.1)$$

$$\nabla \times \tilde{\mathbf{H}} = \tilde{\mathbf{J}} + \frac{\partial \tilde{\mathbf{D}}}{\partial t}, \quad (2.2)$$

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{D}} = \tilde{\rho}, \quad (2.3)$$

$$\nabla \cdot \tilde{\mathbf{B}} = 0. \quad (2.4)$$

Yhtälöt on ilmaistu kolmiulotteisessa euklidisessa avaruudessa  $\mathbb{R}^3$  ja käyttäen SI-yksikköjärjestelmää. Yhtälöissä (2.1)–(2.4) sähkökenttä  $\tilde{\mathbf{E}}$ , sähkövuon tiheys  $\tilde{\mathbf{D}}$ , magneettikenttä  $\tilde{\mathbf{H}}$ , magneettivuon tiheys  $\tilde{\mathbf{B}}$  ja sähkövirran tiheys  $\tilde{\mathbf{J}}$  ovat aika- ja paikkariippuvia kuvauksia  $\mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{R}^3$ . Sähkövaraustiheys  $\tilde{\rho}$  on aika- ja paikkariippuva kuvaus  $\mathbb{R}^4 \rightarrow \mathbb{R}$ . Usein on hyödyllistä tarkastella kenttien taajuuskomponentteja. Esimerkiksi sähkökenttä voidaan esittää kompleksiarvoisten Fourier-komponenttien  $\mathbf{E}(\omega)$  avulla summaamalla tai integroimalla  $\mathbf{E}(\omega)\exp(-i\omega t) + \mathbf{E}^*(\omega)\exp(i\omega t)$  ei-negatiivisten, reaalisten kulmataajuuksien  $\omega$  yli.

Maxwellin yhtälöissä olevat operaattorit ovat lineaarisia ja ratkaistavan Fourier-komponentin aikariippuvuus on  $\exp(-i\omega t)$ , minkä vuoksi Fourier-komponenteille saadaan seuraavanlaiset yhtälöt:

$$\nabla \times \mathbf{E} = i\omega \mathbf{B}, \quad (2.5)$$

$$\nabla \times \mathbf{H} = \mathbf{J} - i\omega \mathbf{D}, \quad (2.6)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{D} = \rho, \quad (2.7)$$

$$\nabla \cdot \mathbf{B} = 0. \quad (2.8)$$

Yhtälöissä (2.5)–(2.8) kentät riippuvat enää paikasta. Kentät  $\mathbf{E}$ ,  $\mathbf{D}$ ,  $\mathbf{H}$ ,  $\mathbf{B}$  ja  $\mathbf{J}$  ovat kuvauksia  $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}^3$  ja  $\rho$  on kuvaus  $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ .

Tässä työssä heräte oletetaan monokromaattiseksi, jolloin kentät voidaan ratkaista yhtälöistä (2.5)–(2.8). Laserin heräte voi todellisuudessa olla myös laajakaistainen, mutta silloinkin tehtävää voidaan mallintaa aikaharmonisena käyttämällä keskustaajuutta tai vaihtoehtoisesti tehtävä voidaan ratkaista kaistan eri taajuuksilla erikseen ja summata eri taajuuksien yli lopuksi.

Makroskooppisten Maxwellin yhtälöiden (2.5)–(2.8) lisäksi vaaditaan tieto väliainerelaatioista [33, luku 6.6]:

$$\mathbf{D} = \epsilon \mathbf{E}, \quad (2.9)$$

$$\mathbf{B} = \mu \mathbf{H}, \quad (2.10)$$

$$\mathbf{J} = \sigma \mathbf{E}. \quad (2.11)$$

Yhtälöissä (2.9)–(2.11) permittiivisyys  $\epsilon$ , permeabiliteetti  $\mu$  ja sähkönjohtavuus  $\sigma$  ovat paikasta ja taajuudesta riippuvia skalaarikenttiä  $\mathbb{R}^3 \rightarrow \mathbb{C}$ . Anisotrooppisissa tapauksissa ne ovat 2-tensorikenttiä. Koska väliainerelaatiot  $(\mathbf{E}, \mathbf{D})$ ,  $(\mathbf{H}, \mathbf{B})$  ja  $(\mathbf{E}, \mathbf{J})$  ovat lineaarisia, ratkaisu Maxwellin yhtälöille voidaan esittää erikseen Fourier-komponenteille.

Taajuustasossa sähkönjohtavuus voidaan sisällyttää permittiivisyyden imaginääriosaan kaavalla  $\epsilon' = \epsilon + i\frac{\sigma}{\omega}$ . Tällöin varaustiheys ja virrantiheys ovat yhtä kuin 0, jolloin tehtävä on johtaville kappaleille samaa muotoa kuin dielektrisille. Käytämme tässä työssä tätä määritelmää olettaen lisäksi, että väliaineen vasteet ovat isotrooppisia.

## 2.2 Materiaalimallit

Aineiden sähköisiä ja magneettisia ominaisuuksia kuvaavat suureet  $\epsilon$ ,  $\mu$  ja  $\sigma$  riippuvat niiden elektronirakenteesta. Kiinteillä aineilla on kidehilamainen rakenne, mikä aiheuttaa vyömäisen elektronirakenteen, jonka muoto selittää monia aineen ominai-

suuksia. Valenssielektronit ja johde-elektronit ovat eri voissä, joiden välinen energiaero määrittää, onko aine eriste, puolijohde vai johde. Eristeille aukko on noin 5-10 eV, mikä on liikaa sille, että elektronit pystyisivät normaalissa huoneenlämpötilassa virittymään johtavuusvyölle. Puolijohteiden elektroniaukko on huoneenlämpötilassa noin 1 eV, mikä mahdollistaa sen, että elektronit voivat huoneenlämpötilassa virittyä johtavuusvyölle. Johteilla energia-aukko valenssivyön suurimman energian, *Fermi-energian*, ja johtavuusvyön välillä on vielä pienempi, mikä tekee niistä hyvin sähköä johtavia, sillä huoneenlämmössä johtavuusvyöllä on elektroneja. Syynä tähän on se, että kaistojen välinen viritys (engl. *interband transition*) vaatii vain pienen määrän energiaa.

Jalometallien optisia ominaisuuksia pystytään kuvaamaan yksinkertaisilla malleilla, jotka eivät ota huomioon elektronien välisiä vuorovaikutuksia. Näistä vapaaelektronimalleista yksinkertaisin on Drude-malli, joka ennustaa sähköiseksi permittiivisyydeksi [19]

$$\frac{\epsilon(\omega)}{\epsilon_0} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)}. \quad (2.12)$$

Edellisessä kaavassa  $\omega_p$  on tilavuusplasmonitaajuus ja  $\gamma$  ( $\gamma \geq 0$ ) on vaimennuskerroin. Ideaalimetalleilla  $\gamma = 0$  ja tilavuusplasmonitaajuus  $\omega_p$  toimii rajana, jolloin ideaalijohde muuttuu selvästi valoa läpäisevästä heijastavaksi kun taajuus pienenee. Vaimennuskerroin  $\gamma$  kuvaa, miten elektroni siroaa atomeista. Se riippuu käänteisesti keskimääräisestä ajasta elektronien ja atomien peräkkäisten törmäysten välillä. Jalometalleille malli toimii parhaiten optisilla ja lähi-infrapunataajuuksilla. Infrapuna-alueella mallin toimivuus on esimerkiksi kullalla tapauksessa heikompi, sillä tällöin jalometalleilla tapahtuu kaistojen välisiä virityksiä, joita Drude-malli ei ota huomioon. Lorentz-malli antaa tällä alueella tarkemman ennustuksen ottamalla huomioon elektroneihin vaikuttavan kaistoista aiheutuvan potentiaalilin. Ottamalla huomioon sekä vapaat elektronit että kaistojen väliset viritykset päädytään Drude-Lorentz-malliin

$$\frac{\epsilon(\omega)}{\epsilon_0} = 1 - \frac{\omega_p^2}{\omega(\omega + i\gamma)} + \sum_n a_n \frac{\omega_p^2}{\omega_n^2 - \omega^2 - i\gamma_n \omega}. \quad (2.13)$$

Kaavassa (2.13) kertoimet  $a_n$  ovat kaistojen välisten viritysten painokertoimet, taajuudet  $\omega_n$  ovat vastaavat resonanssitaajuudet ja kertoimet  $\gamma_n$  ( $\gamma_n \geq 0$ ) ovat vastaavia vaimennuskertoimia.

Kompleksisen permittiivisyyden reaali- ja imaginääriosat riippuvat aina toisistaan Kramers-Kronig-relaatioiden mukaan [11, 19] riippumatta, mitä mallia käytetään. Tämä estää tietyn tyyppisten materiaalien olemassaolon. Esimerkkinä tällaisesta on materiaali, jonka permittiivisyyden reaali- tai imaginääriosat on ei-dispersiivinen eli

ei riipu kulmataajuudesta.

Metalleilla elektronien sironta materiaalin reunoilta tulee merkittäväksi, kun näytteen dimensiot ovat pienemmät kuin johde-elektronien vapaamatka, joka on esimerkiksi kullalle 52 nm [34]. Tällöin permittiivisyys riippuu rakenteen koosta ja tulee merkittäväksi nanoluokan hiukkasten tapauksessa. Kreibig otti huomioon tämän ilmiön tutkiessaan pieniä hopeisia nanohiukkasia [34] siten, että Drude-mallissa muokataan vaimennuskerrointa muotoon

$$\gamma = \gamma_{bulk} + \frac{v_F}{L}. \quad (2.14)$$

Kaavassa (2.14)  $v_F$  on elektronien Fermi-energiaa vastaava nopeus ja  $L$  on keskimääräinen vapaamatka sironnalle näytteen pinnalta.

Drude–Lorentz -mallin sijasta voidaan käyttää myös mitattua permittiivisyyttä. Johnson ja Christy määrittivät kullalle, hopealle ja kuparille kompleksisen permittiivisyyden energia-alueella 0.4–6.5 eV [35]. Taajuustason menetelmissä, kuten elementti- ja reunaelementtimenetelmässä, kokeellisesti määritetyllä permittiivisyydellä saadaan varsinkin ultraviolettialueella tarkempia tuloksia kuin Drude-mallilla. Aikatason menetelmissä, kuten aikataason differenssimenetelmässä, joudutaan laskemaan konvoluutiolla aikariippuvainen permittiivisyys, mikä on helpompaa materiaalmallien avulla kuin mitatusta datasta. Lisäksi materiaalmallit sallivat taajuudelta kompleksisuuden, mikä on etu tarkastellessa sirontakappaleiden ominaistajuuksia, jotka ovat kompleksisia [36].

Metallihiukkasten optiset ominaisuudet aiheutuvat plasmoneista, jotka ovat koherentin johde-elektronikaasun värähtelyn kvantteja. Plasmoneja on kolmea tyyppiä: tilavuus-, pinta- ja hiukkasplasmoni. Tässä työssä keskeisimpiä ovat hiukkasplasmonit, joiden reunaehtona on se, että värähtely on rajoitettu kaikkissa suunnissa. Hiukkasplasmonit virittyvät voimakkaimmin resonanssitajuuksilla, jotka riippuvat nanorakenteen koosta, muodosta, materiaalista sekä ympäröivästä väliaineesta. Nämä resonanssitajuuudet voidaan määritellä yleisessä tapauksessa reunaintegraaliopeattoreilla [36].

## 2.3 Sirontatehtävä

Sirontatehtävä on reuna-arvotekninen, jossa kappaleeseen tuleva herätekenttä ( $\mathbf{E}_{inc}$ ,  $\mathbf{H}_{inc}$ ) aiheuttaa sironnan kentän  $\mathbf{E}_s = \mathbf{E} - \mathbf{E}_{inc}$ ,  $\mathbf{H}_s = \mathbf{H} - \mathbf{H}_{inc}$  kappaleen ympäristössä. Sirontatehtävän asettelu ei ole kuitenkaan mahdollista mielivaltaiselle geometrialle tai herätteelle, vaan niille on asetettava rajoitteet, jotta ratkaisu olisi olemassa ja olisi fysikaalinen.

Tässä työssä tarkastellaan sirontaa klassisella vektorianalyysillä. Joissain tapauksissa voitaisiin tarkastella sirontaa myös kaksiulotteisessa euklidisessa avaruudes-

sa  $\mathbb{R}^2$ . Tämä on mahdollista esimerkiksi tilanteessa, jossa reuna-arvotehtävää voidaan yksinkertaistaa. Esimerkiksi sironta äärettömän pitkstä homogeenisesta sylinteristä on geometrialtaan symmetrinen pitkittäissuuntaan. Vaihtoehtoisesti reuna-arvotehtävä voidaan muotoilla differentiaaligeometrian avulla, jolloin reuna-arvotehtävän muotoilu ei riipu dimensiosta. Tällöin sähkökenttää mallinnetaan polkuun liittyvänä 1-muotona ja sähkövuontiheyttä pintaan liittyvänä 2-muotona. [37]

Sähkömagneettisessa sirontatehtävässä määrittelyalue jaetaan osa-alueisiin. Osa-alueiden on toteutettava tietyt ehdot, jotta ratkaisu olisi fysikaalisesti mielekäs. Ensinnäkin osa-alueiden on toteutettava differentioituvan *moniston* ehdot. Lisäksi pitää valita jokin metriikka [38], jonka suhteen osa-alueet ovat Lipschitz-jatkuvia [39]. Tässä työssä tarkastellaan euklidista avaruutta  $\mathbb{R}^3$ , jolloin metriikkana on euklideen metriikka.

Sähkö- ja magneettikenttä kuuluvat lokaalisti neliöintegroituvien funktioiden  $f : V \rightarrow \mathbb{C}^3$  Hilbert-avaruuden  $\mathbb{L}_{\text{loc}}^2(V)$  sisätulon

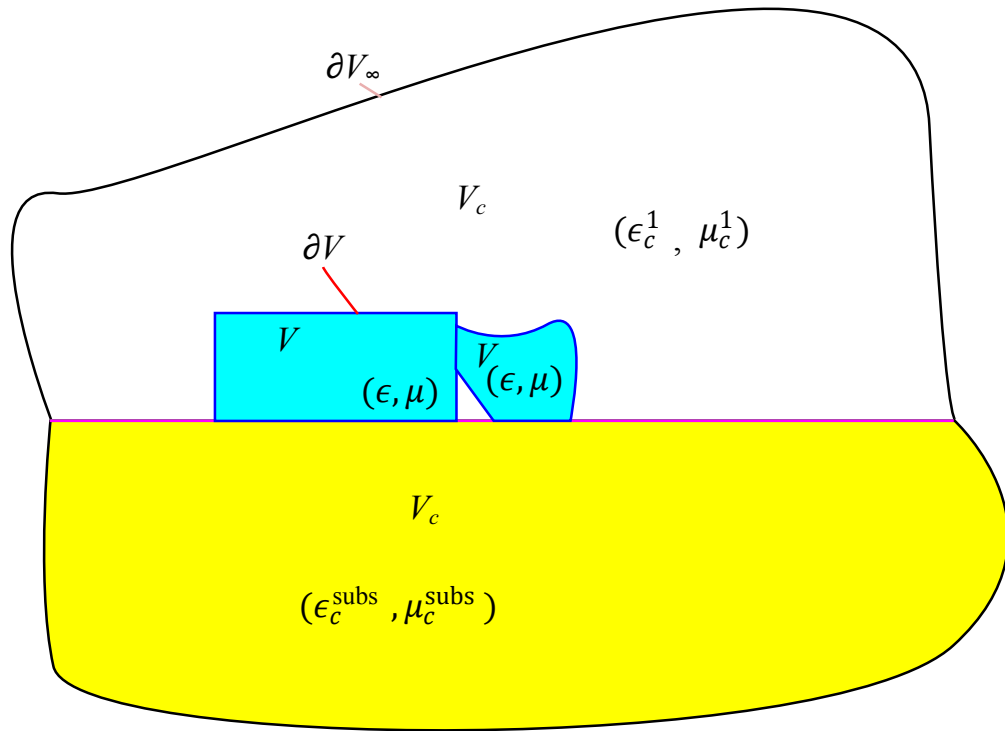
$$\langle \mathbf{f}, \mathbf{g} \rangle = \int_V \mathbf{f}^* \cdot \mathbf{g} dV \quad (2.15)$$

suhteen. Lokaalisti neliöintegroituvuus tilavuuden  $V$  yli tarkoittaa sitä, että funktio on neliöintegroituva kaikkien joukon  $V$  rajoitettujen osajoukkojen yli. Esimerkiksi silloin, kun heräte on tasoaalto, kentät eivät ole neliöintegroituvia koko avaruuden yli, jolloin myöskään syntyvät sironneet kentät eivät ole sitä. Toisin sanoen energia ei ole äärellinen. Koska sirontatehtävä esitetään usein vain sähkö- tai magneettikentän avulla, täytyy myös suureiden roottoreilta vaatia lokaali neliöintegroituvuus, eli sähkö- ja magneettikenttien on kuuluttava avaruuteen

$$\mathbb{L}_{\text{loc}}^2(\text{curl}, V) = \{\mathbf{f} \in \mathbb{L}_{\text{loc}}^2(V) | \nabla \times \mathbf{f} \in \mathbb{L}_{\text{loc}}^2(V)\}. \quad (2.16)$$

Ehdon (2.16) toteutuminen sähkö- tai magneettikentältä riittää takaamaan molempien kenttien lokaalin neliöintegroituvuuden.

Määritellään seuraavaksi lokaalisti neliöintegroituva aikaharmoninen heräte ( $\mathbf{E}_{\text{inc}}, \mathbf{H}_{\text{inc}}$ ) taajuudella  $\omega$ . Heräte etenee häiriöttä alueessa  $V_c$ , jossa ei ole sirottajia. Muu osa koko euklidisesta avaruudesta  $\mathbb{R}^3$  on sirottava alue  $V$ . Tämä on Lipschitz-jatkua differentiaalimonisto, joka on *kompakti*  $\mathbb{R}^3$ :n osajoukko. Euklidisessa avaruudessa joukko on kompakti jos ja vain jos se on suljettu ja rajoitettu. Alue  $V_c$  on aluksi rajoitettu, mutta sen ulkoreuna  $\partial V_\infty$  lähestyy ääretöntä. Merkitään permittiivisyyttä symbolilla  $\epsilon_i$  ja permeabiliteettiä symbolilla  $\mu_i$  väliaineessa  $V_i = V, V_c$ . Lisäksi määritellään aaltoluku  $k_i = \omega \sqrt{\epsilon_i \mu_i}$  ja aaltoimpedanssi  $\eta_i = \sqrt{\frac{\mu_i}{\epsilon_i}}$ . Tässä työssä oletetaan alue  $V_c$  isotrooppiseksi, häviöttömäksi ja alustavasti homogeeniseksi. Tällöin permittiivisyys ja permeabiliteetti ovat reaalisia skalaarikenttiä alueessa  $V$ .



**Kuva 2.1:** Esimerkki sirontatehtävästä, jossa on kaksi nanohiukkasta substraatin pinnalla.

Alue  $V_c$  vaatii vielä lisäkäsittelyn, sillä siellä pitää sallia tasorajapinta, jos halutaan mallintaa substraatti. Motivaationa tähän on se, että kokeelliset näytteet ovat yleensä substraatin pinnalla, mikä vaikuttaa tuloksiin. Substraatin permittiivisyys on  $\epsilon_c^{\text{subs}}$  ja permeabiliteetti on  $\mu_c^{\text{subs}}$ . Muualla alueessa  $V_c$  permittiivisyys on  $\epsilon_c^1$  ja permeabiliteetti on  $\mu_c^1$ . Alue  $V$  oletetaan isotrooppiseksi ja epähomogeeniseksi ja mahdollisesti häviölliseksi.

Substraatin tapauksessa pitää ottaa huomioon, että osa tulevasta herätteestä  $(\mathbf{E}_{\text{inc}}^f, \mathbf{H}_{\text{inc}}^f)$  taittuu ja osa heijastuu substraatin pinnalta. Tällöin heräte  $(\mathbf{E}_{\text{inc}}, \mathbf{H}_{\text{inc}})$  on substraatin ulkopuolella tulevan herätteen ja heijastuneen herätteen  $(\mathbf{E}_{\text{inc}}^r, \mathbf{H}_{\text{inc}}^r)$  summa. Substraatissa heräte on substraatin pinnalta taittunut heräte  $(\mathbf{E}_{\text{inc}}^t, \mathbf{H}_{\text{inc}}^t)$ . Merkitään sähkö- ja magneettikenttiä alueessa  $i$  symboleilla  $\mathbf{E}_i, \mathbf{H}_i$ .

Aikaharmonisista Maxwellin yhtälöistä (2.5)–(2.8) johdetaan *Helmholtz*-yhtälöt kokonaiskentille operoimalla roottorilla yhtälöihin (2.5) ja (2.6). Heräte toteuttaa Helmholtz-yhtälöt  $\mathbb{R}^3$ :ssa, kun sirottajat poistetaan. Substraatin tapauksessa pitää huomioida, että permittiivisyys ja permeabiliteetti muuttuvat siirryttäessä substraattiin. Tässä työssä muodostetaan sirontatehtävä sironneille kentille. Vähentä-

mällä kokonaiskentän ja herätteen Helmholtz-yhtälöt saadaan sironneelle kentälle yhtälöt, jotka sen on toteutettava. Nämä eivät vielä riitä takaamaan sironneiden sähkö- ja magneettikenttien yksikäsitteisyyttä, vaan niiden lisäksi tarvitaan säteilyehto ja sähkö- ja magneettikenttien tangenttikomponentin jatkuvuus rajapinnoilla. Sironneiden kenttien tangentialijatkuvuus seuraa kokonaiskenttien tangentialijatkuvuudesta. Näistä ehdoista saadaan muodostettua reuna-arvotehtävä [40]

$$\nabla \times \frac{1}{\mu_i} \nabla \times \mathbf{E}_s^i - \omega^2 \epsilon_i \mathbf{E}_s^i - \omega^2 \left( \epsilon_i - \epsilon_c \frac{\mu_c}{\mu_i} \right) \mathbf{E}_{\text{inc}} = \mathbf{0}, \text{ alueessa } V_i, \quad (2.17)$$

$$\nabla \times \frac{1}{\epsilon_i} \nabla \times \mathbf{H}_s^i - \omega^2 \mu_i \mathbf{H}_s^i - \omega^2 \left( \mu_i - \mu_c \frac{\epsilon_c}{\epsilon_i} \right) \mathbf{H}_{\text{inc}} = \mathbf{0}, \text{ alueessa } V_i, \quad (2.18)$$

$$\lim_{|\mathbf{r}| \rightarrow \infty} \mathbf{E}_s^c \times \mathbf{r} + |\mathbf{r}| \mathbf{H}_s^c \eta_c = \mathbf{0}, \text{ alueessa } V_c. \quad (2.19)$$

Yhtälöissä (2.17)–(2.19) parametrit, joilla on alaindeksi 0 viittaavat tyhjiön parametreihin. Yhtälö (2.19) on *Silver–Müller*-säteilyehto [41], joka on määritelty reunalla  $\partial V_\infty$  sironneille kentille. Ehto takaa sen, että sironneet kentät etenevät sirottavista kappaleista poispäin ja vaimenevat nopeudella  $r^{-1}$ , missä  $r$  kuvaa etäisyyttä sirottajista. Substraatin tapauksessa substraatin pinnalle syntyy eteneviä pinta-aaltoja, jotka heikkenevät nopeudella  $r^{-1/2}$  [14]. Tällöin Silver–Müller-ehto ei pidä tarkalleen ottaen enää paikkansa, mutta tässä työssä sitä pidetään mallinnusoletuksena. Säteilyehto takaa sen, että sirontatehtävän ratkaisu on yksikäsitteinen, kun kulmataajuus  $\omega$  on reaaliarvoinen [39, 41]. Ehdot (2.17)–(2.19) riittävät sirontatehtävän yksikäsitteiseen ratkaisuun, kunhan sähkö- ja magneettikentät kuuluvat lokaalisti neliöintegroituvaan avaruuteen  $\mathbb{L}_{\text{loc}}^2(\text{curl}, V)$ . Lokaali neliöintegroituvuus takaa sähkö- ja magneettikenttien tangenttikomponentin jatkuvuuden materiaalirajapinnoilla.

## 2.4 Absorptio ja sironta

Sirontatehtävän ratkaisuna saadaan sähkö- ja magneettikentät. Usein näitä kiinnostavampia ovat tehohäviöitä kuvaavat suureet, joita pystytään mittaamaan. Tällaisia ovat absorptio, sironnan ja ekstinktion vuorovaikutusalat. Tässä luvussa johdetaan nämä suureet Bohrenin ja Huffmannin teokseen pohjautuen [19].

Sähkömagneettista tehoa kuvataan *Poyntingin vektorilla*

$$\tilde{\mathbf{S}} = \tilde{\mathbf{E}} \times \tilde{\mathbf{H}}, \quad (2.20)$$

jonka integraali pinnan yli kertoo, paljonko tehoa välittyy pinnan läpi. Yleensä käytetään tämän sijaan aikakeskiarvoistettua Poyntingin vektoria

$$\langle \tilde{\mathbf{S}} \rangle = \frac{1}{\tau} \int_t^{t+\tau} \tilde{\mathbf{S}}(t') dt', \quad (2.21)$$



sillä mittalaitteet eivät pysty mittaamaan Poyntingin vektorin nopeita muutoksia ajan suhteen. Symboli  $\tau$  kuvaa aikavälin pituutta, jolta mitataan keskiarvo. Aikaharmonisessa tapauksessa aikakeskiarvoistettu Poynting-vektori voidaan esittää muodossa

$$\langle \tilde{\mathbf{S}} \rangle = \frac{1}{2} \text{Re}\{\mathbf{E} \times \mathbf{H}^*\}. \quad (2.22)$$

Käytetään tästä lähtien aikakeskiarvoistettua Poyntingin vektoria ja merkitään sitä symbolilla  $\mathbf{S}$ . Pinnan  $A$  läpi kulkevaa tehoa voidaan kuvata integroimalla Poyntingin vektori pinnan yli tehofunktionaalilla

$$W = \int_A \mathbf{S} \cdot \mathbf{n} dA, \quad (2.23)$$

jossa pinnan normaalivektori  $\mathbf{n}$  osoittaa pinnan  $A$  sulkemasta alueesta pois päin. Sähkö- ja magneettikenttien tangentialijatkuvuus väliaineiden rajapinnoilla takaa sen, että energiaa ei katoa tai synny rajapinnoilla. Tällöin ei ole väliä integroidaanko Poyntingin vektoria sisä- vai ulkopinnalla. Yhden kappaleen absorption aiheuttamaa tehohäviötä kuvataan integroimalla kokonaiskentän Poyntingin vektori yli kuvitteellisen pinnan  $A$ , joka sulkee kappaleen sisäänsä

$$W_a = - \int_A \mathbf{S} \cdot \mathbf{n} dA. \quad (2.24)$$

Kappaleen sironnan aiheuttamaa tehohäviötä kuvataan integroimalla sironneiden kenttien Poyntingin vektori

$$\mathbf{S}_s = \frac{1}{2} \text{Re}\{\mathbf{E}_s \times \mathbf{H}_s^*\} \quad (2.25)$$

pinnan  $A$  yli

$$W_s = \int_A \mathbf{S}_s \cdot \mathbf{n} dA. \quad (2.26)$$

Sirottava kappale aiheuttaa ekstinktion eli häviön herätteeseen. Ekstinktion aiheuttama tehohäviö  $W_{\text{ext}}$  on määritelty Poyntingin vektorin  $\mathbf{S}_{\text{ext}} = \mathbf{S} - \mathbf{S}_{\text{inc}} - \mathbf{S}_s$  normaalkomponentin integraalina pinnan  $A$  yli. Symboli  $\mathbf{S}_{\text{inc}}$  kuvaa herätteen Poyntingin vektoria ja on määritelty vastaavalla tavalla kuin sironneiden kenttien Poyntingin vektori. Sitä vastaava tehohäviö on 0. Voidaan osoittaa, että ekstinktio aiheutuu absorptiosta ja sironnasta eli

$$W_{\text{ext}} = W_a + W_s. \quad (2.27)$$

Edellä määriteltyjen tehojen avulla voidaan määritellä vuorovaikutusalat

$$C = \frac{W}{I_{\text{inc}}} \quad (2.28)$$

jakamalla tehofunktionaali herätteen intensiteetillä, joka voidaan ilmaista tasoaal-  
lolle muodossa

$$I_{\text{inc}} = \frac{1}{2} c \epsilon_0 \sqrt{\epsilon_r} |\mathbf{E}_0|^2. \quad (2.29)$$

Ekstinktion vuorovaikutusala (engl. *extinction cross-section*; ECS) saadaan sum-  
maamalla absorption (engl. *absorption cross-section*; ACS) ja sironnan vuorovaiku-  
tusalat (engl. *scattering cross-section*; SCS) keskenään

$$C_{\text{ext}} = C_{\text{a}} + C_{\text{s}}. \quad (2.30)$$

Ekstinktion vuorovaikutusala voidaan laskea myös *optisesta teoreemasta* [42], joka  
kuvaava ekstinktion eteenpäin sironneiden kenttien avulla. Tässä työssä ekstinktion  
vuorovaikutusala lasketaan kuitenkin absorption ja sironnan summana.

Mallinnettaessa substraattia pitää huomioida, että heräte muuttuu siirryttäessä  
substraattiin. Substraatin tapauksessa optinen teoreema ei ole enää samaa muotoa  
kuin ilman substraattia, vaan tällöin ekstinktio riippuu sironnasta heijastuneen ja  
taittuneen herätteen suuntaan [43].

## 2.5 Sironnut kaukokenttä

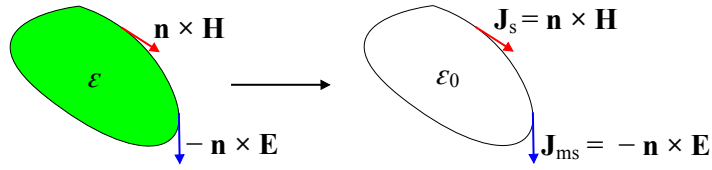
Tutkittaessa nanorakenteita ollaan tehohäviöiden lisäksi usein kiinnostuneita sähkö-  
ja magneettikentästä kaukana sirottajista. Nämä *kaukokentät* saadaan *ekvivalenssi-  
periaatteella*, kun tunnetaan sähkö- ja magneettikenttien tangentialikomponentit  
sirottajien pinnalla. Ekvivalenssiperiaatteen mukaan sironneet kentät voidaan las-  
kea sähköisen ja magneettisen pintavirrantiheyden

$$\mathbf{J}_{\text{s}} = \mathbf{n} \times \mathbf{H}, \quad (2.31)$$

$$\mathbf{J}_{\text{ms}} = -\mathbf{n} \times \mathbf{E}. \quad (2.32)$$

avulla sirottajien pinnalta. Tällöin sirottajien väliaine ajatellaan samaksi kuin ym-  
päristön. Normaalivektori  $\mathbf{n}$  osoittaa alueeseen, jossa sähkö- ja magneettikentät eva-  
luoidaan.

Sironneet kentät saadaan pintavirrantiheyksistä *Greenin funktioiden* avulla. Helm-



**Kuva 2.2:** Ekvivalenssiperiaate.

holtz -yhtälön skalaarinen Greenin funktio  $G$  toteuttaa ehdon

$$\nabla'^2 G + k^2 G = -\delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}'). \quad (2.33)$$

Greenin funktio on vaste pistemäiseen yksikkölähteeseen. Se on yleinen työkalu fysiikassa, joka mahdollistaa integraaliyhtälöiden muotoilun ja lineaaristen reuna-arvotehtävien ratkaisun konvoluution avulla [44]. Greenin funktion löytäminen on usein hankalaa, mutta siihen on useita eri menetelmiä, kuten ominaisfunktiokehittelmä [33], kuvalähdemenetelmä [33], muuttujien separointi [33] ja Laplace-muunnos [45]. Helmholtz-yhtälön skalaarisiksi *fundamentaalisiksi Greenin funktioksi* osoittautuu

$$G(\mathbf{r} - \mathbf{r}') = \frac{e^{\pm ik|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r} - \mathbf{r}'|}. \quad (2.34)$$

Fundamentaali Greenin funktio eroaa koko reuna-arvotehtävän ratkaisevasta Greenin funktiosta siten, että siltä ei vaadita reunaehtojen toteutumista. Ratkaisuis- ta plusmerkkinen kuvaa lähteestä ulospäin eteneviä palloaaltoja ja miinusmerkki- nen kuvaa pistettä päin suppenevia palloaaltoja. Tässä työssä tarkastellaan ulos- päin eteneviä aaltoja, jolloin valitaan ratkaisu, jossa on plusmerkki. Kaavassa (2.33) Laplace-operaattori  $\nabla'^2$  lasketaan paikan  $\mathbf{r}'$  suhteen. Aaltoluku  $k$  viittaa alueeseen  $V_c$ , joka oletetaan aluksi täysin homogeeniseksi, mutta myöhemmin substraatti ote- taan mukaan käsittelyyn. Lähteessä [46, s. 817] on johdettu, miten Greenin toisen identiteetin avulla voidaan johtaa *Kirchoffin* yhtälö, joka kertoo sähkökentän si- rottavien kappaleiden ulkopuolella alueessa  $V_c$ . Suljettujen kappaleiden tapauksessa Kirchoffin yhtälö on ekvivalentti *Stratton–Chun*, *Kottlerin* ja *Franzin* yhtälöiden kanssa [46], joiden avulla sirontatehtävä voidaan ratkaista eri tapauksissa. Kaikkien yhtälöiden ekvivalenssi ei pidä paikkaansa avoimille pinnoille, joita käytetään rat- kaistaessa aukkoantennien säteilemiä kenttiä tai diffraktiota aukosta. Tällöin enää Kottlerin ja Franzin yhtälöt ovat ekvivalentteja ja antavat kentille oikeat lausekkeet.

Sähkömagneettisen sironnan tapauksessa tarkasteltavat pinnat ovat suljettuja,

jolloin voidaan käyttää Stratton–Chu-yhtälöä [47] sähkökentän ratkaisemiseksi alueessa  $V_c$

$$\mathbf{E}_s(\mathbf{r}) = \oint_{\partial V} [i\omega\mu G \mathbf{J}_s + (\mathbf{n} \cdot \mathbf{E}) \nabla' G - (\mathbf{J}_{ms}) \times \nabla' G] dS'. \quad (2.35)$$

Stratton–Chu-yhtälössä (2.35) pinta  $\partial V$  on nanohiukkasten  $V$  ja alueen  $V_c$  välinen pinta. Se on suunnistettu siten, että normaalivektori  $\mathbf{n}$  osoittaa alueeseen  $V_c$ . Sähkö- ja magneettikentät integrandissa riippuvat pisteestä  $\mathbf{r}'$ .

Oletetaan seuraavaksi, että tarkastelupiste  $\mathbf{r}$  on riittävän kaukana origosta, joka on lähellä nanohiukkasia. Kaukokentässä sironneet sähkömagneettiset aallot lähes-tyvät tasoaaltoa, jolloin approksimoidaan

$$G = \frac{e^{ik|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|}}{4\pi|\mathbf{r}-\mathbf{r}'|} \simeq \frac{e^{ikr}}{4\pi r} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}'} \quad (2.36)$$

$$\nabla G \simeq i\mathbf{k}G. \quad (2.37)$$

Aaltovektori  $\mathbf{k} = (kx/r, ky/z, kz/r)$  kuvaa tasoaaltoa, joka etenee origosta suuntaan  $\mathbf{r}$  aaltoluvulla  $k$ , joka on aaltoluku pisteessä  $\mathbf{r}$  alueessa  $V_c$ .

Edellä määritelty Greenin funktio pätee tapauksissa, joissa ei mallinneta substraattia. Skalaarisen Greenin funktion sijaan voidaan käyttää joissain tilanteissa myös *dyadista Greenin funktiota*  $\mathbf{G}$ , joka on määritelty säteilevän sähköisen dipolin aiheuttaman sähkökentän perusteella

$$\mathbf{E}(\mathbf{r}) = \omega^2 \mu_0 \mu \mathbf{G}(\mathbf{r}, \mathbf{r}') \boldsymbol{\mu}, \quad (2.38)$$

missä  $\mathbf{r}'$  on lähdepiste,  $\mathbf{r}$  on tarkastelupiste ja  $\boldsymbol{\mu}$  on sähköinen dipolimomentti. Dyadinen Greenin funktio saadaan myös skalaarisesta Greenin funktiosta käyttämällä kaavaa

$$\mathbf{G} = \left[ \mathbf{I} + \frac{1}{k^2} \nabla \nabla \right] G, \quad (2.39)$$

missä  $\mathbf{I}$  on yksikkömatriisi. Mallinnettaessa substraattia dyadinen Greenin funktio on muotoa [14]

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}_0 + \mathbf{G}_r \quad \text{substraatin ulkopuolella} \quad (2.40)$$

$$\mathbf{G} = \mathbf{G}_t \quad \text{substraatissa.} \quad (2.41)$$

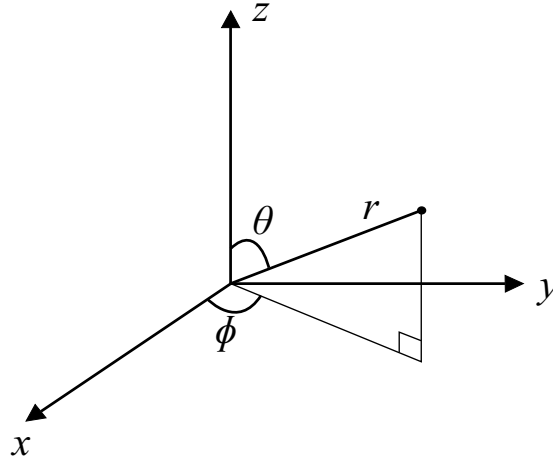
Silloin, kun tarkastelupiste  $\mathbf{r}$  on substraatin ulkopuolella, dyadinen Greenin funktio on dyadisen Greenin funktion pääosan (2.39) ja heijastuneen dyadisen Greenin funktion  $\mathbf{G}_r$  summa. Muutoin käytetään taittunutta Greenin funktiota  $\mathbf{G}_t$ . Heijastunut

ja taittunut Greenin funktio johdetaan tarkastelemalla sähköisen dipolin aiheuttamaa sähkökenttää erikseen substraatin ulkopuolella ja substraattissa. Molemmissa tapauksissa Greenin funktio saadaan soveltamalla Fresnelin kertoimia kaavan (2.38) tasoaaltokehitykseen. Heijastuneen Greenin funktion tapauksessa pitää huomioda, että myös Greenin funktion pääosa on mukana. Dyadisten Greenin funktioiden asymptoottiset muodot on johdettu lähteessä [14, Liite D].

Nyt yhtälöstä (2.35) voidaan ottaa kaukokentän approksimaatio kaukokentän Greenin funktioiden avulla. Kun ei mallinneta substraattia, sironnut kaukokenttä on muotoa

$$\mathbf{E}_s^{\text{far}}(\mathbf{r}) = \frac{ike^{ikr}}{4\pi r} \mathbf{r}_0 \times \oint_{\partial V_c} [\eta \mathbf{r}_0 \times (\mathbf{n} \times \mathbf{H}) - (\mathbf{n} \times \mathbf{E})] e^{-ik\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}_0} dS'. \quad (2.42)$$

Symboli  $\mathbf{r}_0 = \frac{\mathbf{r}}{|\mathbf{r}|}$  on vektorin  $\mathbf{r}$  yksikkövektori ja symboli  $\eta = \sqrt{\frac{\mu}{\epsilon}}$  on aaltoimpedanssi, joka kuvaa sähkö- ja magneettikenttien amplitudien suhdetta. Substraatin tapauksessa sijoitetaan kaava (2.41) kaavaan (2.37), jonka jälkeen sijoitetaan dyadinen Greenin funktio saatuun kaavaan. Voidaan osoittaa, että tällöin kaukokenttä



**Kuva 2.3:** Pallokoordinaatit.

$\mathbf{E}_s^{\text{far}}$  on muotoa

$$E_s^{\text{far}_p}(\mathbf{r}) = \frac{ike^{ikr}}{4\pi r} \mathbf{r}_0 \times \oint_{\partial V_c} [\eta \mathbf{r}_0 \times (\mathbf{n} \times \mathbf{H}) - (\mathbf{n} \times \mathbf{E})] (e^{-ik\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}_0} - r^p(\theta) e^{-ik(\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}_0 - 2zz'/r)}) dS' \cdot \mathbf{n}_\theta, \quad \text{substraatin ulkopuolella} \quad (2.43)$$

$$E_s^{\text{far}_p}(\mathbf{r}) = \frac{ike^{ikr}}{4\pi r} \mathbf{r}_0 \times \oint_{\partial V_c} [\eta \mathbf{r}_0 \times (\mathbf{n} \times \mathbf{H}) - (\mathbf{n} \times \mathbf{E})] (e^{-ik_2 \mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}_0} + r^p(\theta) e^{-ik_2 \mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}_0}) dS' \cdot \mathbf{n}_\theta, \quad \text{substraatissa} \quad (2.44)$$

$$E_s^{\text{far}_s}(\mathbf{r}) = \frac{ike^{ikr}}{4\pi r} \mathbf{r}_0 \times \oint_{\partial V_c} [\eta \mathbf{r}_0 \times (\mathbf{n} \times \mathbf{H}) - (\mathbf{n} \times \mathbf{E})] (e^{-ik\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}_0} + r^s(\theta) e^{-ik(\mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}_0 - 2zz'/r)}) dS' \cdot \mathbf{n}_\phi, \quad \text{substraatin ulkopuolella} \quad (2.45)$$

$$E_s^{\text{far}_s}(\mathbf{r}) = \frac{ike^{ikr}}{4\pi r} \mathbf{r}_0 \times \oint_{\partial V_c} [\eta \mathbf{r}_0 \times (\mathbf{n} \times \mathbf{H}) - (\mathbf{n} \times \mathbf{E})] (e^{-ik_2 \mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}_0} - r^s(\theta) e^{-ik_2 \mathbf{r}' \cdot \mathbf{r}_0}) dS' \cdot \mathbf{n}_\phi, \quad \text{substraatissa} \quad (2.46)$$

$$\mathbf{E}_s^{\text{far}} = E_s^{\text{far}_p} \mathbf{n}_\theta + E_s^{\text{far}_s} \mathbf{n}_\phi. \quad (2.47)$$

Heijastunut sähkökenttä on jaettu pallokoordinaattien mukaan  $\theta$ - ja  $\phi$ -polarisaatioihin. Symbolit  $r^s$  ja  $r^p$  viittaavat vastaaviin Fresnel-kertoimiin, jotka kuvaavat, miten suuri osa näissä polarisaatio-tiloissa olevista tasoaaltojen sähkökentistä heijastuu tullessaan tasomaiselle rajapinnalle. Luvussa 3 käsitellään tarkemmin näitä kertoimia ottaen huomioon myös taittuneiden kenttien Fresnel-kertoimet, jotka kuvaavat, miten suuri osa tasoaallosta taittuu tullessaan tasorajapinnalle. Yhtälöistä (2.43)–(2.47) nähdään, että kaukokentässä sähkökentän radiaalinen komponentti häviää.

Vastaavat magneettikentät saadaan kaavalla

$$\mathbf{H}_s^{\text{far}}(\mathbf{r}) = \mathbf{r}_0 \times \frac{\mathbf{E}_s^{\text{far}}}{\eta_c}. \quad (2.48)$$

Magneettikenttää (2.48) laskiessa täytyy huomioida, että impedanssi  $\eta_c$  on tarkastelupisteen  $\mathbf{r}$  impedanssi. Substraatin tapauksessa se riippuu siitä, onko tarkastelupiste substraatin sisällä.

Kaukokentän avulla voidaan vielä määritellä sirontakuvio (engl. *bistatic radar cross-section*; RCS) [23, 48]

$$C_{\text{RCS}}(\theta, \phi) = \lim_{r \rightarrow \infty} \left( 4\pi r^2 \frac{|\mathbf{S}_s|}{|\mathbf{S}_{\text{inc}}|} \right) = 4\pi r^2 \frac{|\mathbf{E}_s^{\text{far}}|^2}{|\mathbf{E}_{\text{inc}}|^2}, \quad (2.49)$$

joka kuvaa, miten tutkittava rakenne sirottaa valoa eri suuntiin. Kaavassa (2.49)  $\theta \in [0, \pi]$ ,  $\phi \in [0, 2\pi]$  ovat pallokoordinaatteja (ks. kuva 2.3).

### 3. FOKUSOIDUT SÄTEET

Tässä luvussa esitetään vektoriaalisen diffraktioteorian avulla linssillä fokusoitujen Gaussisten säteiden lausekkeet. Lisäksi tarkastellaan substraatin vaikutusta säteisiin. Tarkastelu perustuu pääasiassa Novotнын kirjaan [14, luku 3].

#### 3.1 Kulmaspektriesitys

Laserista saatavien optisten kenttien ominaisuuksia voidaan analysoida kulmaspektriesityksellä (engl. *angular spectrum representation*). Kulmaspektriesitys kuvaa optisia kenttiä homogeenisessa väliaineessa. Optinen kenttä koostuu etenevistä tasoaalloista ja vaimenevista tasoaalloista (engl. *evanescent waves*).

Kulmaspektriesityksessä sähkö- ja magneettikenttä ilmaistaan sarjakehitelmän avulla etenevien ja vaimenevien tasoaaltojen summana. Oletetaan, että kenttä etenee pääasiassa  $z$ -akselin suuntaan ja sen poikittainen rakenne on aluksi tunnettu tasossa  $z = 0$ . Oletetaan lisäksi, että väliaine on  $xy$ -tasossa homogeeninen, isotrooppinen, lineaarinen ja lähteetön. Lisäksi oletetaan, että heräte on aikaharmoninen taajuudella  $\omega$ . Valitulla tasolla sähkö- ja magneettikenttä voidaan ilmaista Fourier-komponenttien avulla muodossa [14]

$$\mathbf{E}(x, y, z) = \iint_{-\infty}^{\infty} \hat{\mathbf{E}}(k_x, k_y, z) e^{i(k_x x + k_y y)} dk_x dk_y. \quad (3.1)$$

Asettamalla Fourier-komponentin paikasta riippuva osa  $\mathbf{E}(\mathbf{r})$  Helmholtz-yhtälöön ja määrittelemällä

$$k_z = \sqrt{k^2 - k_x^2 - k_y^2}, \quad \Im(k_z) \geq 0 \quad (3.2)$$

voidaan näyttää, että Fourier-spektri tasossa  $z \neq 0$

$$\hat{\mathbf{E}}(k_x, k_y, z) = \hat{\mathbf{E}}(k_x, k_y, 0) e^{\pm i k_z z}, \quad (3.3)$$

missä  $e^{\pm i k_z z}$  on *propagaattori*, jonka eksponentissa olevan termin etumerkki kertoo, ollaanko ratkaisemassa sähkökenttää puoliavaruudessa  $z > 0$  vai  $z < 0$ . Valitaan tästä lähtien  $z > 0$ , jota vastaa plusmerkkinen ratkaisu. Tällöin aaltoluvun  $z$ -komponentin positiivinen imaginääriosi takaa sen, että ratkaisu pysyy äärellisenä, kun  $z \rightarrow \infty$ . Asettamalla tämä yhtälöön (3.1) saadaan sähkökentälle kulmaspekt-

riesitys

$$\mathbf{E}(x, y, z) = \iint_{-\infty}^{\infty} \hat{\mathbf{E}}(k_x, k_y, 0) e^{ik_z z} e^{i(k_x x + k_y y)} dk_x dk_y. \quad (3.4)$$

Vastaava lauseke voidaan johtaa myös magneettikentälle  $\mathbf{H}(x, y, z)$ . Kulmaspekttri koostuu etenevistä tasoaalloista ja eksponentiaalisesti vaimenevista tasoaalloista (katso kuva 3.1). Riittävän kaukana referenssitilasta häviävät aallot vaimenevat merkityksettömiksi, jolloin kulmaspektriesityksen integrointialue voidaan redusoida eteneviin tasoaaltoihin.

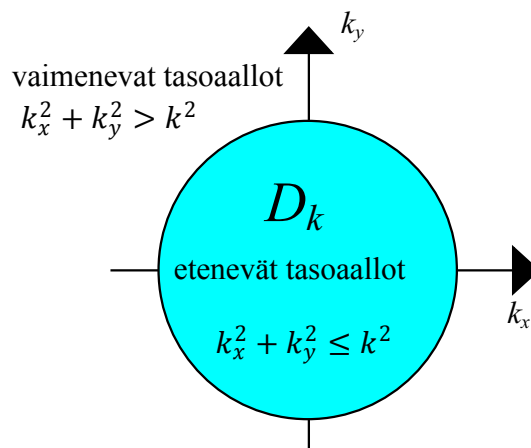
Kun valo etenee likimain jonkin akselin suuntaan, se leviää samalla poikittaisessa suunnassa. Toisinaan leveneminen on kuitenkin hidasta, jolloin voidaan tehdä paraksiaalinen approksimaatio

$$k_z \approx k - \frac{k_x^2 + k_y^2}{2k}, \quad (3.5)$$

joka yksinkertaistaa Fourier-integraaleja. Geometrisessa optiikassa käytetään usein tätä approksimaatiota.

### 3.2 Gaussiset poikittaismuodot paraksiaaliapproksimaatiossa

Seuraavaksi esitellään Gaussiset poikittaismuodot paraksiaaliapproksimaation puitteissa. Lineaarisesti polarisoitunut Gaussinen säde poikkileikkaukseltaan kapeimmalla kohdallaan (ns. säteen vyötärö, joka on oletettu kohtaan  $z = 0$ ) voidaan esittää muodossa



**Kuva 3.1:** Etenevät ja vaimenevat tasoaallot  $k$ -avaruudessa. Silloin, kun aaltovektori  $\mathbf{k}$  kuuluu kiekoon  $D_k$ , kyseinen aalto on etenevä.



$$\mathbf{E}(x, y, 0) = \mathbf{E}_0 e^{-\frac{x^2+y^2}{w_0^2}}, \quad (3.6)$$

jossa  $\mathbf{E}_0$  on vakiovektori  $xy$ -tasossa ja  $w_0$  on vyötärön säde. Sähkökentän voidaan osoittaa paraksiaaliaprosimaatiossa olevan muotoa

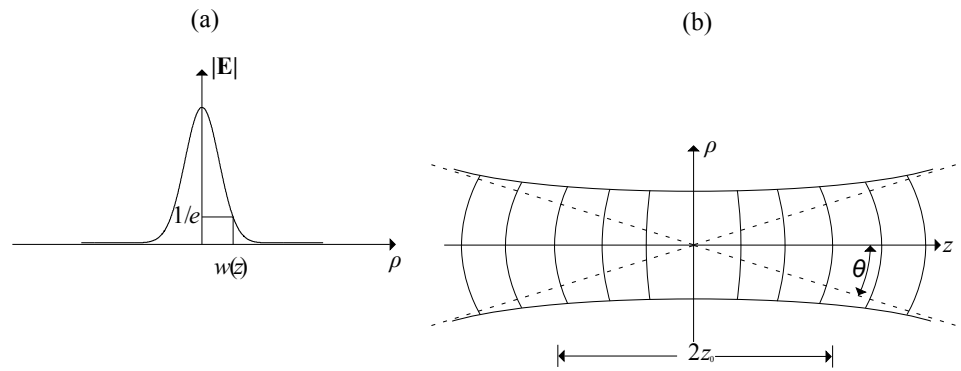
$$\begin{aligned} \mathbf{E}(x, y, z) &= \mathbf{E}_0 \frac{e^{ikz}}{1 + 2iz/kw_0^2} e^{-\frac{x^2+y^2}{w_0^2} \frac{1}{1+2iz/kw_0^2}} \\ &= \mathbf{E}_0 \frac{w_0}{w(z)} e^{-\frac{x^2+y^2}{w^2(z)}} e^{i[kz - \psi(z) + k(x^2+y^2)/(2R(z))]}, \end{aligned} \quad (3.7)$$

missä  $w(z) = w_0(1 + z^2/z_0^2)^{1/2}$  on säteen poikittainen koko kohdassa  $z$ ,  $R(z) = z(1 + z_0^2/z^2)$  on aaltorintaman säde,  $\psi(z) = \arctan(z/z_0)$  on *Gouyn vaihesiirto*,  $z_0 = kw_0^2/2$  on ns. *Rayleighin etäisyys* ja  $\theta = 1/(kw_0)$  on ns. asymptoottinen kulma (ks. kuva 3.2).

Lasersäde voi esiintyä myös muissa poikittaismuodoissa. Esimerkiksi laserkaviteetin peilien avulla voidaan vaikuttaa saatavaan poikittaismuotoon. Hermite–Gaussiset poikittaismuodot HG syntyvät laserkaviteetista, jonka päätypeilien poikkileikkaus on suorakulmainen. Laguerre–Gaussiset poikittaismuodot LG saadaan laserkaviteetista, jonka päätypeilien poikkileikkaus on pyöreä [49]. Matemaattisesti Hermite–Gaussiset muodot  $\mathbf{E}_{nm}^H$  saadaan fundamentaalista Gaussisesta muodosta  $\mathbf{E}$  kaavalla [50]

$$\mathbf{E}_{nm}^H(x, y, z) = w_0^{n+m} \frac{\partial^n}{\partial x^n} \frac{\partial^m}{\partial y^m} \mathbf{E}(x, y, z), \quad (3.8)$$

missä kokonaisluvut  $m$  ja  $n$  kuvaavat moodin kertalukuja. Laguerre–Gaussiset muo-



**Kuva 3.2:** Gaussinen säde paraksiaalisessa approksimaatiossa. Symboli  $\rho = \sqrt{x^2 + y^2}$  kuvaa säteen poikittaista kokoa. Rayleighin etäisyys kuvaa etäisyyttä vyötäröstä, jossa säde pysyy likimain kollimoituna, asymptoottinen kulma  $\theta$  kuvaa kulmaa, jossa säde hajaantuu, kun etäisyys vyöstä kasvaa.

dot  $\mathbf{E}_{nm}^L$  voidaan esittää vastaavasti seuraavassa muodossa

$$\mathbf{E}_{nm}^L(x, y, z) = k^n w_0^{2n+m} e^{ikz} \frac{\partial^n}{\partial z^n} \left( \frac{\partial}{\partial x} + i \frac{\partial}{\partial y} \right)^m \{ \mathbf{E}(x, y, z) e^{-ikz} \}. \quad (3.9)$$

Lisäksi voidaan osoittaa, että Laguerre–Gaussiset muodot voidaan esittää superpositiona äärellisestä määrästä Hermite–Gaussisia muotoja.

Näiden muotojen lineaarikombinaationa voidaan esittää vektoriaaliset poikittaismuodot. Tällaisia ovat esimerkiksi atsimutaalisesti ja radiaalisesti polarisoituneet poikittaismuodot. Radiaalisesti polarisoituneessa poikittaismuodossa RP paikalliset polarisaatiovektorit ovat yhdensuuntaisia poikkileikkauksen radiaalisen yksikkövektorin kanssa. Atsimutaalisesti polarisoituneessa poikittaismuodossa AP paikalliset polarisaatiovektorit ovat kohtisuorassa radiaalivektorin suhteen, jolloin ne ovat yhdensuuntaisia poikkileikkauksen atsimutaalisen yksikkövektorin kanssa. AP-muoto voidaan esittää kahden kohtisuoraan polarisoituneen nollannen kertaluvun ensimmäisen asteen Hermite–Gaussisen muodon  $\text{HG}_{01}$  avulla seuraavasti

$$\text{AP} = -\text{HG}_{01} \mathbf{n}_x + \text{HG}_{01} \mathbf{n}_y. \quad (3.10)$$

RP-muoto voidaan esittää vastaavasti

$$\text{RP} = \text{HG}_{10} \mathbf{n}_x + \text{HG}_{10} \mathbf{n}_y. \quad (3.11)$$

Radiaalisen ja atsimutaalisen muodon avulla voidaan määritellä radiaalisen hybridipolarisaation poikittaismuoto

$$\text{HR} = \text{RP} \cos \alpha + \text{AP} \sin \alpha. \quad (3.12)$$

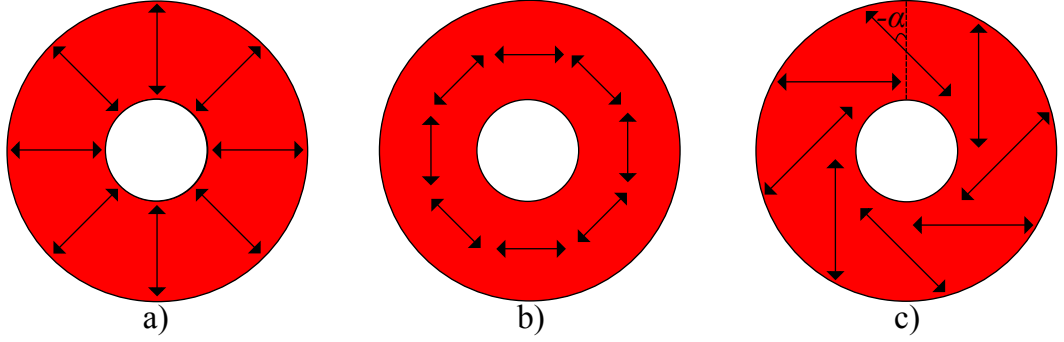
Kulma  $\alpha$  kuvaa sähkökenttävektorin poikkeamaa radiaalisesta suunnasta. Tällainen poikittaismuoto saadaan aikaan RP-poikittaismuodosta käyttämällä hyväksi aaltolevyjä, jotka muuttavat säteen polarisaatiotilaa kulman  $\alpha$  verran [51]. Edellä mainittuja vektoriaalisia muotoja kutsutaan myös donitsimuodoiksi niiden donitsimaisen intensiteettikuvion vuoksi (ks. kuva 3.3).

### 3.3 Poikittaismuotojen fokusointi

Kulmaspektriesityksestä (3.4) voidaan johtaa asymptoottinen kaukokenttä pisteessä  $\mathbf{r} = \mathbf{r}_\infty$ . Määritellään dimensioton yksikkövektori  $\mathbf{s}$ , joka osoittaa suuntaan  $\mathbf{r}_\infty$ :

$$\mathbf{s} = (s_x, s_y, s_z) = (x/r, y/r, z/r), r = \sqrt{x^2 + y^2 + z^2}. \quad (3.13)$$

Kaukokenttäaproksimaatiossa vaimenevat tasoaallot voidaan jättää huomioimat-



**Kuva 3.3:** Radiaalisen a), atsimutaalisen b) ja radiaalisen hybridipolarisaation c) poikittaismuodon poikkileikkaus.

ta, jolloin integrointi tapahtuu vain ympyrässä  $D_k$ . Kaukokenttää kuvaava integraali on vaikea evaluoida analyttisesti, mutta se voidaan laskea stationäärivaiheen menetelmällä [52]. Kaukokentän  $\mathbf{E}_\infty$  ja tason  $z = 0$  Fourier-spektrin  $\hat{\mathbf{E}}$  välille saadaan riippuvuus

$$\mathbf{E}_\infty(s_x, s_y, s_z) = -2\pi i k s_z \hat{\mathbf{E}}(k s_x, k s_y, 0) \frac{e^{i k r}}{r}. \quad (3.14)$$

Sijoittamalla  $k_x = k s_x, k_y = k s_y$  nähdään, että

$$\mathbf{s} = (s_x, s_y, s_z) = (k_x/k, k_y/k, k_z/k), \quad (3.15)$$

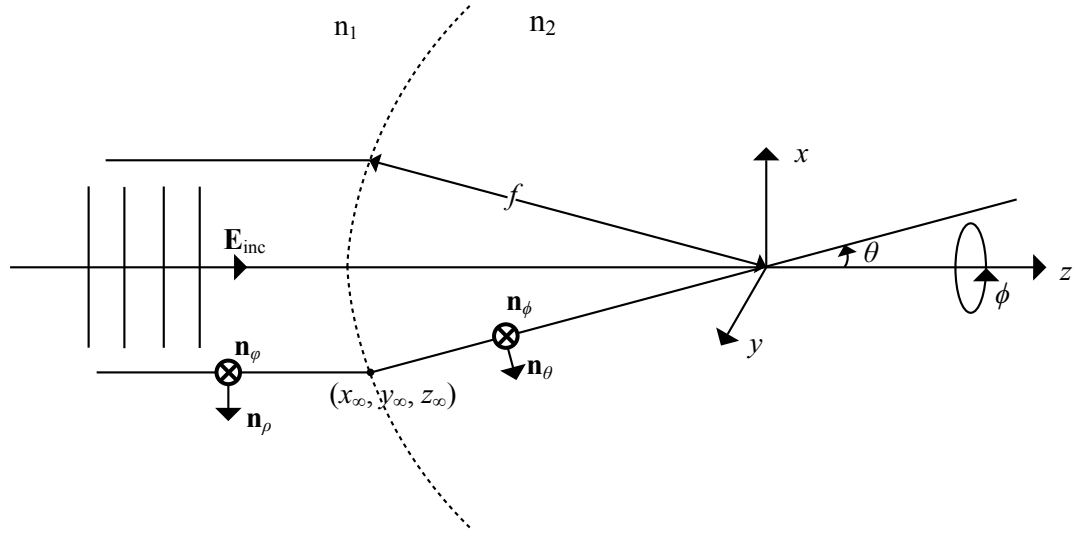
mikä tarkoittaa sitä, että vain yksi tasoaalto, jonka aaltovektori on  $\mathbf{k}$ , kulmaspektriesityksessä aiheuttaa kaukokentän suuntaan  $\mathbf{s}$  ja kaikkien muiden vaikutus tähän suuntaan kumoutuu destruktiivisen interferenssin vuoksi. Kaava (3.14) voidaan esittää myös muodossa

$$\hat{\mathbf{E}}(k_x, k_y, 0) = \frac{i r e^{-i k r}}{2\pi k_z} \mathbf{E}_\infty(k_x, k_y). \quad (3.16)$$

Sijoittamalla tämä kulmaspektriesitykseen saadaan

$$\mathbf{E}(x, y, z) = \frac{i r e^{-i k r}}{2\pi} \iint_{D_k} \mathbf{E}_\infty(k_x, k_y) e^{i(k_x x + k_y y + k_z z)} \frac{1}{k_z} dk_x dk_y. \quad (3.17)$$

Tarkastellaan seuraavaksi optisten kenttien fokusointia linssillä. Tätä varten tarkastellaan, miten tuleva kenttä käyttäytyy, kun se kohtaa linssin, ja miten se etenee linssistä fokukseen. Oletetaan aplanaattinen linssi (ks. kuva 3.4), jolloin linssin läpäisevät säteet etenevät geometrisesti kohti polttopistettä. Olkoon taitekerroin ennen linssiä  $n_1$  ja linssin jälkeen  $n_2$ . Linssistä taittuneet sähkö- ja magneettikenttä voi-



**Kuva 3.4:** Aplanaattinen systeemi ja käytetyt koordinaatit ennen linssiä ja sen jälkeen. Aplanaattiselle systeemille on ominaista se, että linssistä taittuneet säteet etenevät kohti fokusta ja säteiden amplitudit vaimenevat kuten  $1/r$  fokuksesta.

daan päätellä energian säilymisen ja linssin polttovälin  $f$  perusteella. Ennen linssiä käytetään napakoordinaatteja  $(\rho, \varphi)$ , jonka jälkeen siirrytään pallokoordinaatteihin  $(r, \theta, \phi)$  (ks. kuva 3.4). Origo on linssin fokuksessa. Olettaen ei-magneettiset väliaineet linssin taittaman kentän voidaan osoittaa olevan muotoa [14]

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_\infty(\theta, \phi) = & t^s(\theta) \left[ \mathbf{E}_{\text{inc}}(\theta, \phi) \cdot \begin{pmatrix} -\sin \phi \\ \cos \phi \\ 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} -\sin \phi \\ \cos \phi \\ 0 \end{pmatrix} \sqrt{\frac{n_1}{n_2}} (\cos \theta)^{1/2} \\ & + t^p(\theta) \left[ \mathbf{E}_{\text{inc}}(\theta, \phi) \cdot \begin{pmatrix} \cos \phi \\ \sin \phi \\ 0 \end{pmatrix} \right] \begin{pmatrix} \cos \phi \cos \theta \\ \sin \phi \cos \theta \\ -\sin \theta \end{pmatrix} \sqrt{\frac{n_1}{n_2}} (\cos \theta)^{1/2}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

Symbolit  $t^s$  ja  $t^p$  ovat Fresnel-kertoimet taittumisen kuvan 3.4 tason suuntaiselle sähkökentän komponentille ja vastaavasti tason normaalin suuntaiselle komponentille. Ne kuvaavat, miten valo kulkee linssin läpi. Esitetään fokusoidun kentän aaltovek-

torin  $\mathbf{k}$  komponentit pallokoordinaateissa perustuen tulokseen (3.15):

$$k_x = k \sin \theta \cos \phi \quad (3.19)$$

$$k_y = k \sin \theta \sin \phi \quad (3.20)$$

$$k_z = k \cos \theta. \quad (3.21)$$

Tällöin kaukokenttä on muotoa  $\mathbf{E}_\infty(k_x, k_y)$ . Nyt sähkökenttä lähellä fokusta saadaan sijoittamalla  $\mathbf{E}_\infty$  kulmaspektriesitykseen (3.17), jolloin kenttä fokuksen lähellä määräytyy kentästä heti linssin jälkeen. Kaikki säteet etenevät kohti fokusta  $(x, y, z) = (0, 0, 0)$  eikä vaimenevia tasoaaltoja ole mukana. Muokataan tasointegraali  $k_x$ :n ja  $k_y$ :n yli integraaliksi pallokoordinaateissa

$$\frac{1}{k_z} dk_x dk_y = k \sin \theta d\theta d\phi, \quad (3.22)$$

jolloin sähkökenttä fokuksen lähellä saadaan kaavalla

$$\mathbf{E}(\rho, \varphi, z) = \frac{ikf e^{-ikf}}{2\pi} \int_0^{\theta_{\max}} \int_0^{2\pi} \mathbf{E}_\infty(\theta, \phi) e^{ikz \cos \theta} e^{ik\rho \sin \theta \cos(\phi-\varphi)} \sin \theta d\phi d\theta. \quad (3.23)$$

Fokuksen ja linssin pinnan välistä etäisyyttä  $\mathbf{r}_\infty$  on merkitty symbolilla  $f$ , joka on linssin polttoväli. Symboli  $\theta_{\max}$  kuvaa maksimiarvoa, jonka  $\theta$  voi saada. Tämä on välillä  $(0 < \theta_{\max} < \pi)$ , mikä johtuu siitä, että linssit ovat todellisuudessa äärellisen kokoisia. Linssin numeerinen aukko NA on määritelty tämän kaavanavulla

$$\text{NA} = n_2 \sin \theta_{\max}, \quad (3.24)$$

kuvaa linssin kykyä kerätä valoa.

Oletetaan linssiin tuleva sähkökenttä  $x$ -polarisoituneeksi  $\mathbf{E}_{\text{inc}} = E_{\text{inc}} \mathbf{n}_x$ . Lisäksi oletetaan, että tulevan säteen vyötärö osuu linssiin, jolloin aaltorintama linssin kohdalla on tasomainen. Linssin Fresnel-kertoimet taittumiselle oletetaan ykkösiksi  $t^s(\theta) = t^p(\theta) = 1$ , jolloin kaikki linssiin tuleva valo taittuu. Näillä oletuksilla  $\mathbf{E}_\infty(\theta, \phi)$  voidaan ilmaista muodossa

$$\mathbf{E}_\infty(\theta, \phi) = E_{\text{inc}}(\theta, \phi) \frac{1}{2} \begin{pmatrix} (1 + \cos \theta) - (1 - \cos \theta) \cos 2\phi \\ -(1 - \cos \theta) \sin 2\phi \\ -2 \cos \phi \sin \theta \end{pmatrix} \sqrt{\frac{n_1}{n_2}} (\cos \theta)^{1/2}, \quad (3.25)$$

jossa vektori on karteesisissa koordinaateissa. Linssiin tulevana kenttänä käytetään Gaussisten säteiden paraksiaaliapproksimaatioita. Käytetään tässä Hermite–Gaus-

sisia muotoja  $HG_{00}$ ,  $HG_{10}$  ja  $HG_{01}$ .

$HG_{00}$ :

$$E_{\text{inc}} = E_0 e^{-(x_\infty^2 + y_\infty^2)/w_0^2} = E_0 e^{-f^2 \sin^2 \theta / w_0^2}, \quad (3.26)$$

$HG_{10}$ :

$$E_{\text{inc}} = E_0 (2x_\infty / w_0) e^{-(x_\infty^2 + y_\infty^2)/w_0^2} = (2E_0 f / w_0) \sin \theta \cos \phi e^{-f^2 \sin^2 \theta / w_0^2}, \quad (3.27)$$

$HG_{01}$ :

$$E_{\text{inc}} = E_0 (2y_\infty / w_0) e^{-(x_\infty^2 + y_\infty^2)/w_0^2} = (2E_0 f / w_0) \sin \theta \sin \phi e^{-f^2 \sin^2 \theta / w_0^2}. \quad (3.28)$$

Näissä kaavoissa esiintyy kerroin  $f_w(\theta) = \exp(-f^2 \sin^2(\theta)/w_0^2)$ , jota sanotaan apodisaatiofunktioksi. Apodisaatiofunktio kuvaa fysikaalisesti jonkin funktion päämaksimia poistaen sivumaksimit. Sitä käytetään paljon muun muassa poistamaan diffraktion aiheuttamia *Airy'n funktion* sivumaksimeja. Integrointi muuttujan  $\phi$  suhteen voidaan suorittaa analyttisesti Besselin funktioiden avulla

$$\int_0^{2\pi} \cos n\phi e^{ix \cos(\phi-\varphi)} d\phi = 2\pi(i^n) J_n(x) \cos n\varphi \quad (3.29)$$

$$\int_0^{2\pi} \sin n\phi e^{ix \cos(\phi-\varphi)} d\phi = 2\pi(i^n) J_n(x) \sin n\varphi, \quad (3.30)$$

missä integraaleissa  $J_n$  on asteen  $n$  Besselin funktio. Tämän jälkeen kentät fokuksessa riippuvat enää yhden muuttujan integraalista. Otetaan käyttöön seuraavat lyhennysmerkinnät

$$I_{00} = \int_0^{\theta_{\text{max}}} f_w(\theta) (\cos \theta)^{1/2} \sin \theta (1 + \cos \theta) J_0(k\rho \sin \theta) e^{ikz \cos \theta} d\theta, \quad (3.31)$$

$$I_{01} = \int_0^{\theta_{\text{max}}} f_w(\theta) (\cos \theta)^{1/2} \sin^2 \theta J_1(k\rho \sin \theta) e^{ikz \cos \theta} d\theta, \quad (3.32)$$

$$I_{02} = \int_0^{\theta_{\text{max}}} f_w(\theta) (\cos \theta)^{1/2} \sin \theta (1 - \cos \theta) J_2(k\rho \sin \theta) e^{ikz \cos \theta} d\theta, \quad (3.33)$$

$$I_{10} = \int_0^{\theta_{\text{max}}} f_w(\theta) (\cos \theta)^{1/2} \sin^3 \theta J_0(k\rho \sin \theta) e^{ikz \cos \theta} d\theta, \quad (3.34)$$

$$I_{11} = \int_0^{\theta_{\text{max}}} f_w(\theta) (\cos \theta)^{1/2} \sin^2 \theta (1 + 3 \cos \theta) J_1(k\rho \sin \theta) e^{ikz \cos \theta} d\theta, \quad (3.35)$$

$$I_{12} = \int_0^{\theta_{\max}} f_w(\theta) (\cos \theta)^{1/2} \sin^2 \theta (1 - \cos \theta) J_1(k\rho \sin \theta) e^{ikz \cos \theta} d\theta, \quad (3.36)$$

$$I_{13} = \int_0^{\theta_{\max}} f_w(\theta) (\cos \theta)^{1/2} \sin^3 \theta J_2(k\rho \sin \theta) e^{ikz \cos \theta} d\theta, \quad (3.37)$$

$$I_{14} = \int_0^{\theta_{\max}} f_w(\theta) (\cos \theta)^{1/2} \sin^2 \theta (1 - \cos \theta) J_3(k\rho \sin \theta) e^{ikz \cos \theta} d\theta. \quad (3.38)$$

Edellä olevat integraalit riippuvat muuttujista  $\rho$  ja  $z$ . Lopulta sähkö- ja magneettikentät lähellä fokusta saadaan seuraaviin muotoihin.

HG<sub>00</sub>:

$$\mathbf{E}(\rho, \varphi, z) = \frac{ikf}{2} \sqrt{\frac{n_1}{n_2}} E_0 e^{-ikf} \begin{pmatrix} I_{00} + I_{02} \cos 2\varphi \\ I_{02} \sin 2\varphi \\ -2iI_{01} \cos \varphi \end{pmatrix}, \quad (3.39)$$

$$\mathbf{H}(\rho, \varphi, z) = \frac{ikf}{2\eta} \sqrt{\frac{n_1}{n_2}} E_0 e^{-ikf} \begin{pmatrix} I_{02} \sin 2\varphi \\ I_{00} - I_{02} \cos 2\varphi \\ -2iI_{01} \sin \varphi \end{pmatrix}. \quad (3.40)$$

HG<sub>10</sub>:

$$\mathbf{E}(\rho, \varphi, z) = \frac{ikf^2}{2w_0} \sqrt{\frac{n_1}{n_2}} E_0 e^{-ikf} \begin{pmatrix} iI_{11} \cos \varphi + iI_{14} \cos 3\varphi \\ -iI_{12} \sin \varphi + iI_{14} \sin 3\varphi \\ -2I_{10} + 2I_{13} \cos 2\varphi \end{pmatrix}, \quad (3.41)$$

$$\mathbf{H}(\rho, \varphi, z) = \frac{ikf^2}{2w_0\eta} \sqrt{\frac{n_1}{n_2}} E_0 e^{-ikf} \begin{pmatrix} -iI_{12} \sin \varphi + iI_{14} \sin 3\varphi \\ i(I_{11} + 2I_{12}) \cos \varphi - iI_{14} \cos 3\varphi \\ I_{13} \sin 2\varphi \end{pmatrix}. \quad (3.42)$$

HG<sub>01</sub>:

$$\mathbf{E}(\rho, \varphi, z) = \frac{ikf^2}{2w_0} \sqrt{\frac{n_1}{n_2}} E_0 e^{-ikf} \begin{pmatrix} i(I_{11} + 2I_{12}) \sin \varphi + iI_{14} \sin 3\varphi \\ -iI_{12} \cos \varphi - iI_{14} \cos 3\varphi \\ I_{13} \sin 2\varphi \end{pmatrix} \quad (3.43)$$

$$\mathbf{H}(\rho, \varphi, z) = \frac{ikf^2}{2w_0\eta} \sqrt{\frac{n_1}{n_2}} E_0 e^{-ikf} \begin{pmatrix} -iI_{12} \cos \varphi - iI_{14} \cos 3\varphi \\ iI_{11} \sin \varphi - iI_{14} \sin 3\varphi \\ -2I_{10} - 2I_{13} \cos 2\varphi \end{pmatrix}. \quad (3.44)$$

Atsimutaalisen muodon AP fokusointi voidaan päätellä muodon (0,1) fokusoinnista

kaavan (3.10) mukaan

$$\mathbf{E}(\rho, \varphi, z) = \frac{ikf^2}{2w_0} \sqrt{\frac{n_1}{n_2}} E_0 e^{-ikf} \begin{pmatrix} i(I_{11} + 3I_{12}) \sin \varphi \\ -i(I_{11} + 3I_{12}) \cos \varphi \\ 0 \end{pmatrix} \quad (3.45)$$

$$\mathbf{H}(\rho, \varphi, z) = \frac{ikf^2}{2w_0\eta} \sqrt{\frac{n_1}{n_2}} E_0 e^{-ikf} \begin{pmatrix} i(I_{11} - I_{12}) \cos \varphi \\ i(I_{11} - I_{12}) \sin \varphi \\ -4I_{10} \end{pmatrix}. \quad (3.46)$$

Radiaalisen muodon RP fokusointi päätellään vastaavasti kaavasta (3.11)

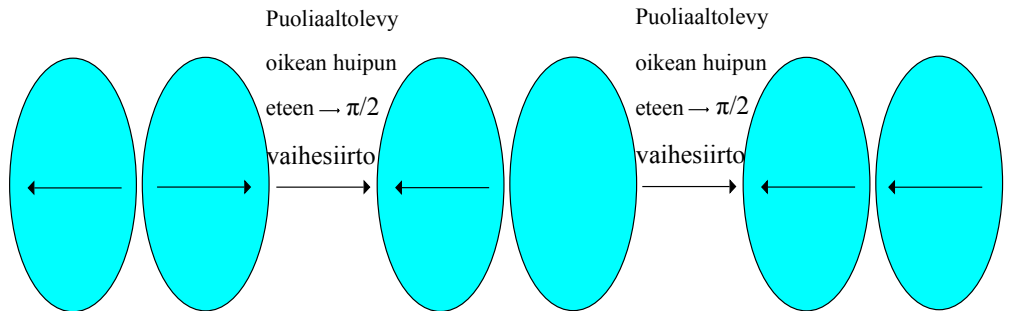
$$\mathbf{E}(\rho, \varphi, z) = \frac{ikf^2}{2w_0} \sqrt{\frac{n_1}{n_2}} E_0 e^{-ikf} \begin{pmatrix} i(I_{11} - I_{12}) \cos \varphi \\ i(I_{11} - I_{12}) \sin \varphi \\ -4I_{10} \end{pmatrix} \quad (3.47)$$

$$\mathbf{H}(\rho, \varphi, z) = \frac{ikf^2}{2w_0\eta} \sqrt{\frac{n_1}{n_2}} E_0 e^{-ikf} \begin{pmatrix} -i(I_{11} + 3I_{12}) \sin \varphi \\ i(I_{11} + 3I_{12}) \cos \varphi \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (3.48)$$

Radiaalisen hybridipolarisaation poikittaismuodolle HR voidaan johtaa vastaavat kaavat lähtemällä liikkeelle kaavasta (3.12).

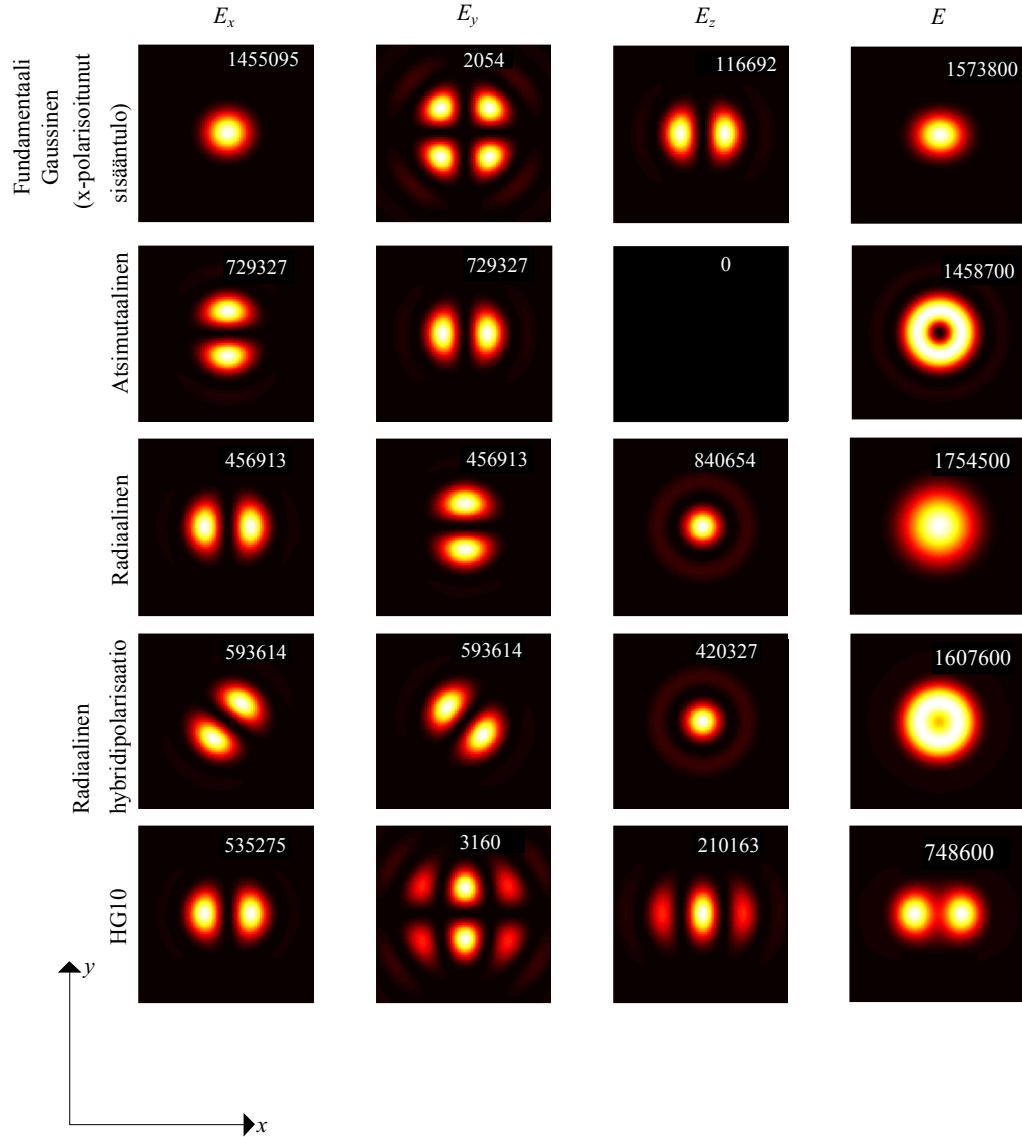
RP-muodon avulla saadaan aikaan huomattava sähkökentän  $z$ -komponentti fokusoidaessa (ks. kuva 3.6). Tämä on tärkeää esimerkiksi nanolankojen tutkimuksen kannalta [53], mikä tullaan näkemään luvussa 5.

Poikittaismuodolle HG<sub>10</sub> voidaan tehdä aaltolevyjen avulla vaihesiirtymä eri huippujen välille (ks. kuva 3.5). Tämä tekee herätteestä epäsymmetrisen, millä on vaikutusta optiseen vasteeseen. Vaiheen manipulointi vaikuttaa erityisesti SHG:n saantoon. Nanoantenneissa vaihesiirto vaikuttaa huomattavasti lähikenttiin mahdollistaen intensiteettimaksimien (engl. *hot spots*) päälle ja pois päältä kytkemisen [54].



**Kuva 3.5:** Hermite–Gaussista poikittaismuotoa HG<sub>10</sub> voidaan muokata puoliaaltolevyn avulla. Lopulta amplitudin huiput, joita on merkitty sinisillä ellipsoidella, saadaan samaan vaiheeseen.





**Kuva 3.6:** Sähkökentän intensiteetti fokusoidaessa poikittaismuotoja. Laskuissa käytettiin tulevan säteen vyön leveytenä  $w_0 = 800 \mu\text{m}$ , polttovälinä  $f = 1000 \mu\text{m}$ , aallonpituutena  $\lambda = 1,060 \mu\text{m}$ , numeerisena aukkona  $\text{NA}=0,8$  ja taitekertoimen linssiä ennen ja sen jälkeen arvoa  $n = n_1 = n_2 = 1$ . Tulevan kentän lausekkeissa käytettiin amplitudina  $E_0 = 1 \text{ V/m}$ . Kuvien oikeissa yläkulmissa on intensiteetin maksimiarvo. Kuva on piirretty polttotasossa  $z = 0 \text{ m}$  alueessa  $[-2, 2] \mu\text{m} \times [-2, 2] \mu\text{m}$ .

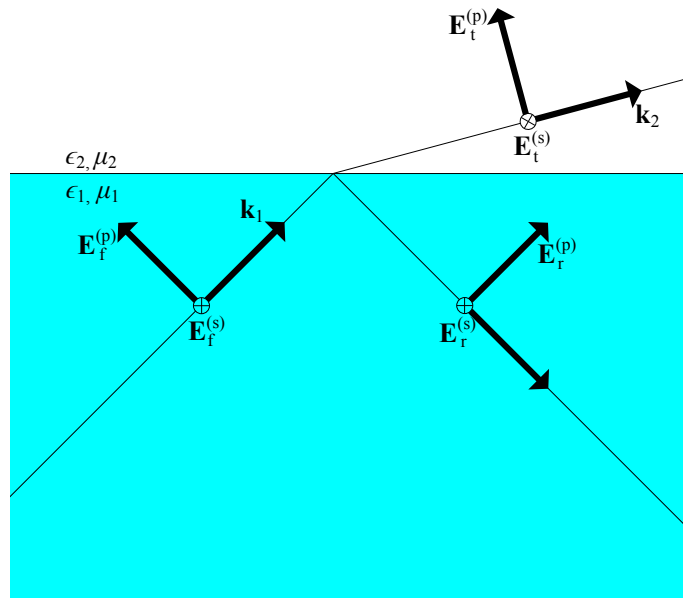
### 3.4 Fokusointi substraatin lähellä

Kokeellisissa tilanteissa näytteen alla oleva substraatti vaikuttaa yleensä tuloksiin ainakin jonkin verran. Tämän takia tässä työssä halutaan mallintaa myös substraatin vaikutus. Oletetaan taitekerroin  $n_1$  ennen substraattia ja taitekerroin  $n_2$  substraatin sisällä. Substraatin pinta on kohdassa  $z = z_0$  ja origo on säteen fokuksessa. Substraatin pinta voi olla joko fokusta ennen tai sen jälkeen. Säde fokusoidaan vasemmalta ( $z < z_0$ ) substraatin lähelle. Aaltovektorin komponentit  $k_x$  ja  $k_y$  ovat jatkuvia väliainerajapinnan yli. Aaltovektorin  $z$ -komponentti alueessa ( $z < z_0$ ) on  $k_{z1} = (k_1^2 - k_x^2 - k_y^2)^{1/2}$  ja alueessa ( $z > z_0$ ) se on  $k_{z2} = (k_2^2 - k_x^2 - k_y^2)^{1/2}$ . Symbolit  $k_1 = n_1 \frac{\omega}{c}$  ja  $k_2 = n_2 \frac{\omega}{c}$  kuvaavat vastaavia aaltolukuja. Väliainerajapinta johtaa heijastumiseen ja taittumiseen. Tällöin kokonaissähkökenttä voidaan esittää muodossa

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_f + \mathbf{E}_r, \quad z < z_0, \quad (3.49)$$

$$\mathbf{E} = \mathbf{E}_t, \quad z > z_0. \quad (3.50)$$

Symboli  $\mathbf{E}_f$  kuvaa sähkökenttää, joka olisi fokuksessa ilman substraattia. Symboli  $\mathbf{E}_r$  kuvaa substraatin pinnalta heijastunutta sähkökenttää ja  $\mathbf{E}_t$  substraatin pinnalta taittamaa sähkökenttää. Heijastuksen ja taittumisen suhdetta voidaan kuvata Fresnel-kertoimien avulla tasoaalloille.



**Kuva 3.7:** Sähkökentän jakaminen polarisaatiovektoreihin s ja p, taittuminen väliainerajapinnasta.

$$r^s(k_x, k_y) = \frac{\mu_2 k_{z_1} - \mu_1 k_{z_2}}{\mu_2 k_{z_1} + \mu_1 k_{z_2}}, \quad r^p(k_x, k_y) = \frac{\epsilon_2 k_{z_1} - \epsilon_1 k_{z_2}}{\epsilon_2 k_{z_1} + \epsilon_1 k_{z_2}}, \quad (3.51)$$

$$t^s(k_x, k_y) = \frac{2\mu_2 k_{z_1}}{\mu_2 k_{z_1} + \mu_1 k_{z_2}}, \quad t^p(k_x, k_y) = \frac{2\epsilon_2 k_{z_1}}{\epsilon_2 k_{z_1} + \epsilon_1 k_{z_2}} \sqrt{\frac{\mu_2 \epsilon_1}{\mu_1 \epsilon_2}}. \quad (3.52)$$

Kaavoista (3.51) ja (3.52) nähdään, että heijastus- ja taitekertoimet ( $r^s, r^p, t^s, t^p$ ) riippuvat tasoaallon polarisaatiosta (s tai p), sähköisistä ja magneettisista ominaisuuksista sekä tulokulmasta. Kulmaspektrisesityksessä tasoaalto pitää hajottaa polarisaation mukaan kahteen osaa  $\mathbf{E} = \mathbf{E}^{(s)} + \mathbf{E}^{(p)}$  (ks. kuva 3.7). Heijastuneelle ja taittuneelle kentälle voidaan johtaa vastaavanlaiset kulmaspektrisesitykset kuin substraattiin tulevalle kentälle

$$\mathbf{E}_r(x, y, z) = \frac{if e^{-ik_1 f}}{2\pi} \iint_{k_x, k_y} \mathbf{E}_r^\infty(k_x, k_y) e^{i(k_x x + k_y y - k_{z_1} z)} \frac{1}{k_{z_1}} dk_x dk_y, \quad (3.53)$$

$$\mathbf{E}_t(x, y, z) = \frac{if e^{-ik_1 f}}{2\pi} \iint_{k_x, k_y} \mathbf{E}_t^\infty(k_x, k_y) e^{i(k_x x + k_y y + k_{z_2} z)} \frac{1}{k_{z_2}} dk_x dk_y. \quad (3.54)$$

Kaavassa (3.53) miinusmerkki termin  $k_{z_1}$  edessä takaa sen, että kenttä etenisi taaksepäin  $-z$ -suuntaan. Taittuneen kentän etenemistä kuvaa aaltovektori  $k_2$ .

Kaukokentät  $\mathbf{E}_r^\infty$  ja  $\mathbf{E}_t^\infty$  saadaan reunaehdoista substraatin pinnalla. Sijoittamalla Fresnel-kertoimet (3.51) ja (3.52) saadaan

$$\mathbf{E}_r^\infty(\theta, \phi) = -E_{\text{inc}}(k_x, k_y) e^{2ik_{z_1} z_0} \begin{pmatrix} -r^s k_y^2 + r^p k_x^2 k_{z_1}/k_1 \\ r^s k_x k_y + r^p k_x k_y k_{z_1}/k_1 \\ 0 + r^p (k_x^2 + k_y^2) k_x/k_1 \end{pmatrix} \frac{\sqrt{k_{z_1}/k_1}}{k_x^2 + k_y^2}, \quad (3.55)$$

$$\mathbf{E}_t^\infty(\theta, \phi) = E_{\text{inc}}(k_x, k_y) e^{i(k_{z_1} - k_{z_2}) z_0} \begin{pmatrix} t^s k_y^2 + t^p k_x^2 k_{z_2}/k_2 \\ -t^s k_x k_y + t^p k_x k_y k_{z_2}/k_2 \\ 0 - t^p (k_x^2 + k_y^2) k_x/k_2 \end{pmatrix} \frac{k_{z_2}}{k_{z_1}} \frac{\sqrt{k_{z_1}/k_1}}{k_x^2 + k_y^2}. \quad (3.56)$$

Yhtälöt (3.53)–(3.56) määrittelevät sähkökentän fokuksessa, kun substraatti on fokuksen lähellä. Esitetään Besselin funktion integraalit (3.31)–(3.36) heijastuneelle ja taittuneelle kentälle

$$I_{00}^r = \int_0^{\theta_{\max}} f_w(\theta) (\cos \theta)^{1/2} \sin \theta (r^s - r^p \cos \theta) \cdot J_0(k\rho \sin \theta) e^{ik(2z_0 - z) \cos \theta} d\theta, \quad (3.57)$$

$$I_{00}^t = \int_0^{\theta_{\max}} f_w(\theta) (\cos \theta)^{1/2} \sin \theta \left( t^s + t^p \frac{\sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \theta}}{n_2 \cos \theta} \cos \theta \right) \cdot J_0(k\rho \sin \theta) e^{i(k_{z_2}(z - z_0) + k z_0 \cos \theta)} d\theta, \quad (3.58)$$

$$I_{01}^r = \int_0^{\theta_{\max}} f_w(\theta) (\cos \theta)^{1/2} r^p \sin^2 \theta \cdot J_1(k\rho \sin \theta) e^{ik(2z_0-z) \cos \theta} d\theta, \quad (3.59)$$

$$I_{01}^t = \int_0^{\theta_{\max}} f_w(\theta) (\cos \theta)^{1/2} t^p \frac{n_1}{n_2} \sin^2 \theta \cdot J_1(k\rho \sin \theta) e^{i(k_{z_2}(z-z_0)+kz_0 \cos \theta)} d\theta, \quad (3.60)$$

$$I_{02}^r = \int_0^{\theta_{\max}} f_w(\theta) (\cos \theta)^{1/2} \sin \theta (r^s + r^p \cos \theta) \cdot J_2(k\rho \sin \theta) e^{ik(2z_0-z) \cos \theta} d\theta, \quad (3.61)$$

$$I_{02}^t = \int_0^{\theta_{\max}} f_w(\theta) (\cos \theta)^{1/2} \sin \theta \left( t^s - t^p \frac{\sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \theta}}{n_2 \cos \theta} \cos \theta \right) \cdot J_2(k\rho \sin \theta) e^{i(k_{z_2}(z-z_0)+kz_0 \cos \theta)} d\theta, \quad (3.62)$$

$$I_{10}^r = \int_0^{\theta_{\max}} f_w(\theta) (\cos \theta)^{1/2} \sin^3 \theta r^p \cdot J_0(k\rho \sin \theta) e^{ik(2z_0-z) \cos \theta} d\theta, \quad (3.63)$$

$$I_{10}^t = \int_0^{\theta_{\max}} f_w(\theta) (\cos \theta)^{1/2} \sin^3 \theta t^p \frac{n_1}{n_2} \cdot J_0(k\rho \sin \theta) e^{i(k_{z_2}(z-z_0)+kz_0 \cos \theta)} d\theta, \quad (3.64)$$

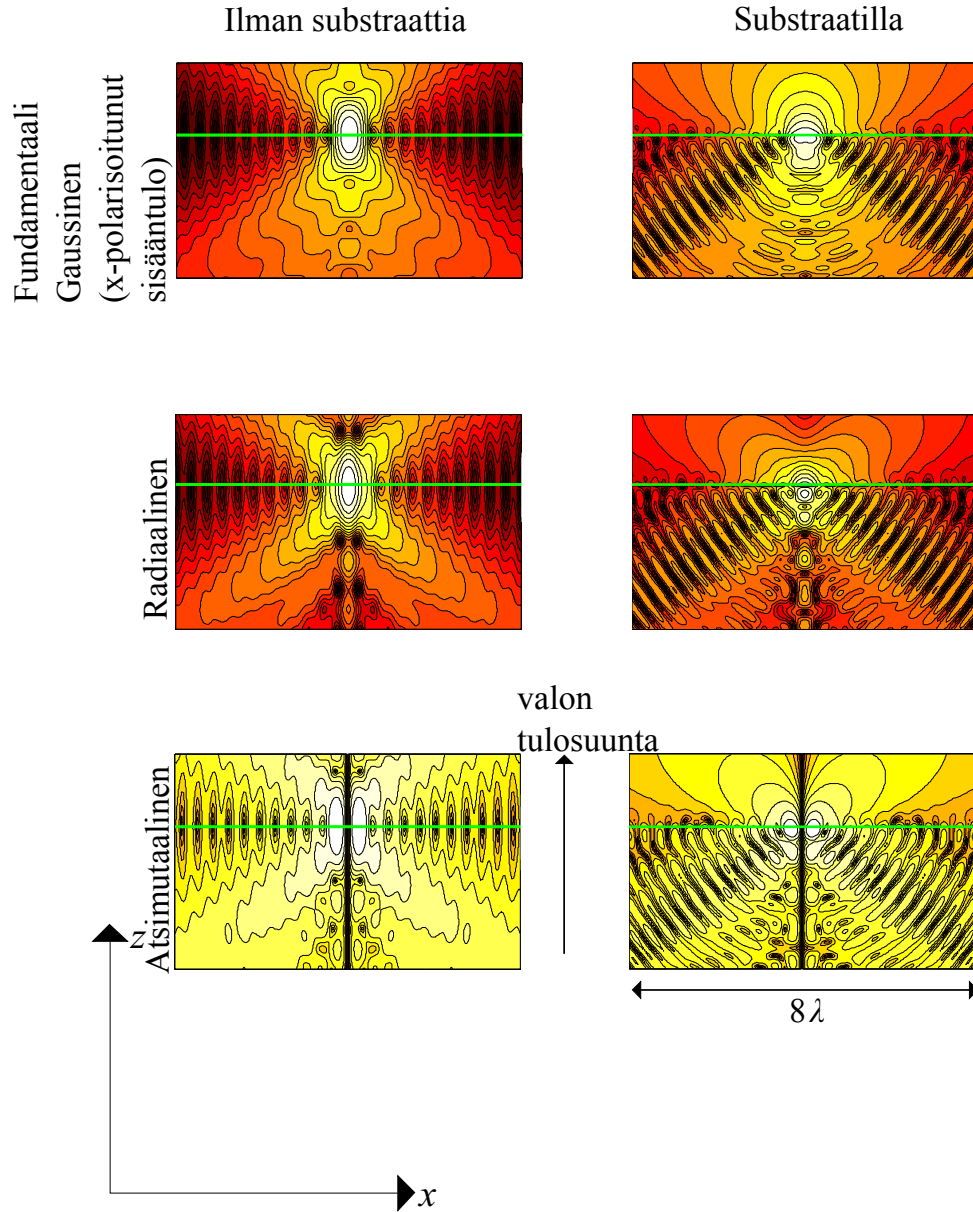
$$I_{11}^r = \int_0^{\theta_{\max}} f_w(\theta) (\cos \theta)^{1/2} \sin^2 \theta (r^s - 3r^p \cos \theta) \cdot J_1(k\rho \sin \theta) e^{ik(2z_0-z) \cos \theta} d\theta, \quad (3.65)$$

$$I_{11}^t = \int_0^{\theta_{\max}} f_w(\theta) (\cos \theta)^{1/2} \sin^2 \theta \left( t^s + 3t^p \frac{\sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \theta}}{n_2 \cos \theta} \cos \theta \right) \cdot J_1(k\rho \sin \theta) e^{i(k_{z_2}(z-z_0)+kz_0 \cos \theta)} d\theta, \quad (3.66)$$

$$I_{12}^r = \int_0^{\theta_{\max}} f_w(\theta) (\cos \theta)^{1/2} \sin^2 \theta (r^s + r^p \cos \theta) \cdot J_1(k\rho \sin \theta) e^{ik(2z_0-z) \cos \theta} d\theta, \quad (3.67)$$

$$I_{12}^t = \int_0^{\theta_{\max}} f_w(\theta) (\cos \theta)^{1/2} \sin^2 \theta \left( t^s - t^p \frac{\sqrt{n_2^2 - n_1^2 \sin^2 \theta}}{n_2 \cos \theta} \cos \theta \right) \cdot J_1(k\rho \sin \theta) e^{i(k_{z_2}(z-z_0)+kz_0 \cos \theta)} d\theta. \quad (3.68)$$

Edellisissä kaavoissa Fresnel-kertoimien riippuvuus aaltovektorista on ilmaistu pallokoordinaatin  $\theta$  avulla. Lopulliset lausekkeet heijastuneelle ja taittuneelle kentälle fokuksessa on esitetty Liitteessä A. Näistä voidaan päätellä kokonaiskenttä kaavoilla (3.49) ja (3.50). Kuvassa 3.8 on esimerkki kokonaiskentistä, kun substraatin vaikutus otetaan huomioon. Myös monikerroksisen rakenteen vaikutusta fokusoituun säteeseen voidaan mallintaa [55].



**Kuva 3.8:** Sähkökentän intensiteetti fokusoitaessa poikkitaismuotoja lasista ( $n=1,518$ ) ilmaan. Intensiteetti on skaalattu kymmenkantisella logaritmilla. Lasin ja ilman rajapinta sijaitsee kohdassa  $z = 0$  (merkitty vaaleanvihreällä). Laskuissa käytettiin tulevan säteen vyötärön leveytenä  $w_0 = 800 \mu\text{m}$ , polttovälinä  $f = 500 \mu\text{m}$ , aallonpituutena  $\lambda = 1,060 \mu\text{m}$ , numeerisena aukkona  $\text{NA}=1,4$ . Tulevan kentän lausekkeissa käytettiin amplitudina  $E_0 = 1 \text{ V/m}$ .

## 4. SIRONTEHTÄVÄN RATKAISU ELEMENTTIMENETELMÄLLÄ

Tässä luvussa muunnetaan sirontatehtävä (2.17)–(2.19) tietokoneelle ratkaistavaan muotoon. Tätä varten esitellään sirontatehtävän *heikko muoto*, jonka avulla voidaan muodostaa sirontatehtävän likiarvoinen ratkaisu käyttäen elementtimenetelmää. Lopuksi elementtimenetelmää verrataan muihin menetelmiin sirontatehtävän ratkaisemiseksi.

### 4.1 Variaatiomenetelmät ja elementtimenetelmä

Sirontatehtävän tarkka ratkaisu löytyy ääretöndimensioisesta Hilbert-avaruudesta  $\mathbb{L}_{\text{loc}}^2(V)$ . Tarkkaa ratkaisua ei kuitenkaan voida löytää analyyttisesti muille kuin geometrisesti yksinkertaisille kappaleille, joiden sähköiset ja magneettiset ominaisuudet ovat riittävän yksinkertaiset. Tämän vuoksi sirontatehtävälle etsitään likiarvoinen ratkaisu avaruuden  $\mathbb{L}_{\text{loc}}^2(V)$  äärellisdimensioisesta osajoukosta. Tätä varten esitellään *variaatiomenetelmät*.

Variaatiolaskennan tavoitteena on löytää funktio  $u(x)$ , joka antaa ääriarvon niin sanotulle *funktionaalille* eli kuvaukselle, joka liittyy reaaliluvun tarkasteltavaan funktioon. Tämä tapahtuu varioimalla funktiota eli lisäämällä siihen termi  $\delta u(x) = \epsilon u(x)$ , siten että varioitu funktio minimoi funktionaalin silloin, kun  $\epsilon = 0$ . Lopulta ääriarvon etsiminen palautuu differentiaaliyhtälön ratkaisuun.

Variaatioperiaatteella on monia tärkeitä ominaisuuksia, joista tärkein on mahdollisuus hakea ongelman likiarvoratkaisua. Lisäksi varioitavalla funktiolla on usein selkeä fysikaalinen merkitys, se on invariantti koordinaatistomuunnosten suhteen, se mahdollistaa jonkin suureen ylä- ja alarajaratkaisut tai ongelman muuntamisen toiseksi ekvivalentiksi ongelmaksi, joka on ehkä helpommin ratkaistavissa. [56]

Tarkastellaan esimerkiksi reuna-arvotehtävä

$$Fu = f \quad \text{differentiaaliyhtälö,} \quad (4.1)$$

$$Au = a \quad \text{reunaehto.} \quad (4.2)$$

Oletetaan, että operaattorit  $F$  ja  $A$  ovat lineaarisia.

*Painotettujen jäännösten menetelmässä* (engl. *minimum weighted residual met-*

*hod*) tuntematonta funktiota approksimoidaan yritteellä

$$\tilde{u} = \sum_{i=1}^n \alpha_i \phi_i, \quad (4.3)$$

missä funktiot  $\phi_i$  ovat sopivasti valittuja kantafunktioita ja kertoimet  $\alpha_i$  ovat tuntemattomia parametrejä. Kerrotaan reuna-arvotehtävä *paino- eli testifunktiolla*

$$w = \sum_{i=1}^n W_i w_i, \quad (4.4)$$

jossa funktiot  $W_i$  ovat kantafunktioita ja kertoimet  $w_i$  ovat mielivaltaisia parametrejä. [56]

Muodostetaan reuna-arvotehtävästä residuaali sijoittamalla siihen yrite (4.4), ja vaaditaan se nolaksi testiavaruudessa eli joukossa, jonka funktiot  $W_i$  virittävät. [56]

$$\int_{\Omega} w(F\tilde{u} - f)dV + \gamma \int_S w(A\tilde{u} - a)dS = 0. \quad (4.5)$$

Symboli  $\gamma$  on painokerroin,  $\Omega$  on reuna-arvotehtävän määrittelyalue ja  $S$  sen reuna. Sijoitetaan lopulta painofunktion lauseke (4.4) yhtälöön (4.5), jolloin saadaan

$$\sum_{i=1}^n \left( \int_{\Omega} W_i(F\tilde{u} - f)dV + \gamma \int_S W_i(A\tilde{u} - a)dS \right) w_i = 0 \quad (4.6)$$

Koska parametrit  $w_i$  ovat mielivaltaisia, sulkujen sisällä olevien lausekkeiden on hävitettävä, jolloin saadaan  $n$  kappaletta yhtälöitä. Nämä voidaan ilmaista kompaktisti

$$\sum_{j=1}^n K_{ij} \alpha_j = f_i, i = 1, \dots, n, \quad (4.7)$$

jossa

$$K_{ij} = \int_{\Omega} W_i F \phi_j dV + \gamma \int_S W_i A \phi_j dS, \quad (4.8)$$

$$f_i = \int_{\Omega} W_i f dV + \gamma \int_S W_i a dS. \quad (4.9)$$

Lineaarisesta yhtälöryhmästä (4.7) voidaan ratkaista tuntemattomat parametrit  $\alpha_i$ . Painofunktioiden  $W_i$  täytyy olla *lineaarisesti riippumattomia*, jotta yhtälön ratkaisu olisi yksikäsitteinen. Painotettujen jäännösten menetelmässä reuna-arvotehtävä (4.1)–(4.2) ei välttämättä toteudu pisteittäin, vaan integraalin mielessä. Tämän vuoksi sitä sanotaan heikennetyksi muodoksi alkuperäisestä vahvasta muodosta. Heikon muodon (4.5) voidaan myös tulkita antavan likimääräisen ratkaisun  $\tilde{u}$ , joka on

tarkan ratkaisun  $u$  ortogonaaliprojektio sisätulon  $\langle \cdot, \cdot \rangle$  mielessä, missä kohtisuoruutta mitataan painofunktioiden  $w$  mielessä, joka ei ole välttämättä samassa funktioavaruudessa kuin itse yritefunktio  $\tilde{u}$ . [56]

Tuntemattoman funktion  $u$  approksimaation  $\tilde{u}$  sileysominaisuuksien pitää olla sopuoinnussa operaattorin  $F$  korkeimman kertaluvun derivaatan kanssa. Jos operaattorin  $F$  kertaluku on  $2n$ , yrittteen  $\tilde{u}$  pitää olla  $2n - 1$  kertaa jatkuvasti derivoituva, siis  $\tilde{u} \in C_{2n-1}$ . Yrittteen  $\tilde{u}$  valinta riippuu tarkasteltavasta ongelmasta. Yleensä se kannattaa valita ratkaisun luonteen mukaan. [56]

Eräs usein käytetyistä painofunktioista on Diracin deltafunktio  $W_i = \delta(\mathbf{r} - \mathbf{r}_i)$ . Tähän valintaan perustuvaa menetelmää sanotaan *kollokaatiomenetelmäksi*. Menetelmän etu on se, että integraalit yksinkertaistuvat funktioiden arvoiksi pisteissä  $\mathbf{r}_i$ . Huono puoli on se, että testaus tapahtuu vain pisteissä  $\mathbf{r}_i$ , mikä tekee menetelmästä epätarkan. [56]

*Pienimmän neliön menetelmässä* painofunktioksi valitaan itse jäännöstermi, jolloin saadaan seuraava variaatiomuoto

$$\min \frac{1}{2} \left[ \int_{\Omega} (F\tilde{u} - f)^2 dV + \gamma^2 \int_S (A\tilde{u} - a)^2 dS \right]. \quad (4.10)$$

*Galerkinin menetelmässä* painofunktioiksi valitaan yritefunktiot, eli  $W_i = \phi_i$ .

*Rayleighin ja Ritzin menetelmässä* lähdetään liikkeelle minimoitavasta funktionaalista. Menetelmä on muuten identtinen Galerkinin menetelmän kanssa. Galerkinin menetelmä on kuitenkin yleispätevämpi, sillä se ei vaadi sitä, että ongelma on seuraus funktionaalien minimoimisesta. [56]

Elementtimenetelmä voidaan johtaa variaatiomenetelmästä rajoittamalla kantafunktioiden kantaja

$$\text{supp}(\phi_i) = \overline{\{x \in \Omega | \phi_i(x) \neq 0\}}. \quad (4.11)$$

tarkasteltavan alueen  $\Omega$  osa-alueeksi, mistä tulee nimi äärellisten elementtien menetelmä.

Elementtimenetelmä vaatii aluksi elementtityyppien valitsemisen, johon kuuluu elementin muodon, kantafunktioiden ja elementin vapaiden parametrien eli *vapausasteiden* määrittely.

Kantafunktiot voidaan jakaa tavanomaisiin ja hierarkkisiin kantafunktioihin. Tavanomaisessa elementtimenetelmän  $h$ -versiossa ratkaisun parantaminen tapahtuu elementtien lukumäärää lisäämällä, jolloin elementtien koko  $h$  pienenee. Hierarkkiset kantafunktiot ovat perustana  $p$ -elementtimenetelmässä, jossa ratkaisun tarkkuuden lisääminen tapahtuu kantafunktioina toimivien interpolaatiopolynomien astetta  $p$  korottamalla. [56]



## 4.2 Helmholtzin yhtälön heikko muoto

Aluksi elementtimenetelmää käytettiin pääasiassa kiinteän aineen mekaniikan ongelmiin sen geometrisen joustavuuden ja muunneltavuuden vuoksi [56]. Tällöin elementtimenetelmän solveltaminen sähkömagneetiikan ongelmiin osoittautui vielä hankalaksi johtuen sähkö- ja magneettikenttien tangentialikomponenttien jatkuvuudesta väliaineiden rajapinnoilla. Sopivien kantafunktioiden löydyttyä elementtimenetelmää pystyttiin soveltamaan myös sähkömagneetiikan ongelmiin. Seuraavassa ratkaistaan sirontatehtävä sähkö- ja magneettikentille, mutta tehtävä voitaisiin muotoilla myös skalaari- ja vektoripotentiaalille.

Käytetään Galerkinin painotusta sironneen sähkökentän yhtälöön (2.17). Testifunktioilla  $W_i$  painottamisen jälkeen yhtälö (2.17) integroidaan tehtäväalueen  $V \cup V_c$  yli, jolloin saadaan

$$\begin{aligned} \int_{V \cup V_c} \mathbf{W}_i \cdot \left[ \nabla \times \left( \frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{E}_s \right) - \omega^2 \epsilon \right] d\Omega \\ = \int_{V \cup V_c} \mathbf{W}_i \cdot \omega^2 \left( \epsilon - \epsilon_c \frac{\mu_c}{\mu} \right) \mathbf{E}_{\text{inc}} d\Omega. \end{aligned} \quad (4.12)$$

Käyttäen vektori-identiteettiä

$$\begin{aligned} \nabla \cdot \left[ \mathbf{W}_i \times \left( \frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{E}_s \right) \right] &= \frac{1}{\mu} (\nabla \times \mathbf{W}_i) \cdot (\nabla \times \mathbf{E}_s) \\ &\quad - \mathbf{W}_i \cdot \left[ \nabla \times \left( \frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{E}_s \right) \right] \end{aligned} \quad (4.13)$$

ja Gaussin teoreemaa

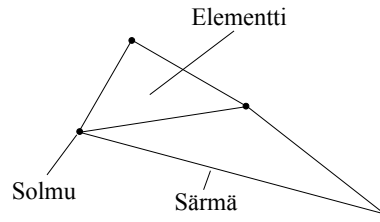
$$\int_{V \cup V_c} \nabla \cdot \left[ \mathbf{W}_i \times \left( \frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{E}_s \right) \right] d\Omega = \oint_{\partial V_\infty} \mathbf{n} \cdot \left[ \mathbf{W}_i \times \left( \frac{1}{\mu} \nabla \times \mathbf{E}_s \right) \right] dS \quad (4.14)$$

saadaan sirontatehtävän heikko muoto

$$\begin{aligned} \int_{V \cup V_c} \left[ \frac{1}{\mu} (\nabla \times \mathbf{W}_i) \cdot (\nabla \times \mathbf{E}_s) - \omega^2 \epsilon \mathbf{W}_i \cdot \mathbf{E}_s \right] d\Omega \\ - \oint_{\partial V_\infty} i\omega \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} (\mathbf{n} \times \mathbf{W}_i) \cdot (\mathbf{n} \times \mathbf{E}_s) dS \\ + \int_V \mathbf{W}_i \cdot \omega^2 \left( \epsilon - \epsilon_c \frac{\mu_c}{\mu} \right) \mathbf{E}_{\text{inc}} d\Omega = 0. \end{aligned} \quad (4.15)$$

Kaavan (4.15) reunaintegraali on saatu olettamalla Silver–Müller-ehto (2.19) toteutumaan reunalla  $\partial V_\infty$  ja sijoittamalla tämä Gaussin teoreemasta saatavaan reunaintegraaliin kaavassa (4.14).

Sähkökentän  $\mathbf{E}$  tangentialijatkuvuus elementin rajapinnan yli voidaan taata va-

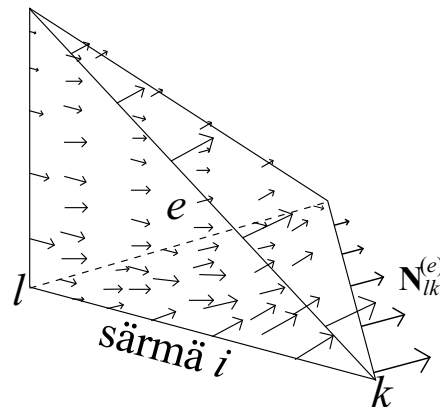


**Kuva 4.1:** Kaksiulotteinen kahden elementin verkko.

litsemalla elementin särmän suuntaiset kantafunktiot. Tarkastellaan kolmiulotteista aluetta, ja valitaan elementiksi tetraedri (3-simpleksi). Merkitään solmuun  $k$  viittavaa lineaarisia skalaarisia interpolaatiofunktioita symbolilla  $N_k$ . Nämä funktiot ovat niin sanottuja *barysentrisiä koordinaatteja* (engl. *barycentric coordinates*), jotka on määritelty siten, että tetraedrin  $e$  sisälle muodostetaan uusi tetraedri tarkasteltavan pisteen  $\mathbf{r}$  ja muiden tetraedrin solmujen kuin  $k$ :n välille, lasketaan muodostetun tetraedrin tilavuus ja jaetaan tämä tetraedrin  $e$  tilavuudella. Vektoriaaliset kantafunktiot (ks. kuva 4.1) on määritelty skalaaristen kantafunktioiden avulla kaavalla

$$\mathbf{N}_{lk}^{(e)}(\mathbf{r}) = \left[ N_l^{(e)} \nabla N_k^{(e)} - N_k^{(e)} \nabla N_l^{(e)} \right] \ell_{lk}^{(e)} \quad l < k, \quad (4.16)$$

missä  $\ell_{lk}^{(e)}$  on solmujen  $l$  ja  $k$  välinen etäisyys, jolla on etumerkki.  $\ell_{lk}^{(e)}$  on plusmerkinen, kun  $n(l, e) < n(k, e)$ , missä  $n(k, e)$  antaa elementin  $e$  solmun *lokaalille* numerolle  $k$  globaalin numeron, mikä takaa sen, että kaikilla verkon solmuilla on oma globaali numeronsa. Muuten  $\ell_{lk}^{(e)}$  on miinusmerkinen. Tämä takaa sen, että vektoriaaliset kantafunktiot, jotka on määritelty yhteisen särmän jakavissa elementeissä,



**Kuva 4.2:** Vektoriaalinen kantafunktio  $\mathbf{N}_{lk}^{(e)}$  särmälle  $i$ .

osoittavat samaan suuntaan. Vektorikantafunktioita sanotaan myös *särmäelementeiksi*. Sironnut kenttä tetraedrin sisällä saadaan kaavalla

$$\begin{aligned} \mathbf{E}_s^{(e)}(x, y, z) = & \mathbf{N}_{12}^{(e)}(x, y, z)E_{12}^{(e)} + \mathbf{N}_{13}^{(e)}(x, y, z)E_{13}^{(e)} + \mathbf{N}_{14}^{(e)}(x, y, z)E_{14}^{(e)} \\ & + \mathbf{N}_{23}^{(e)}(x, y, z)E_{23}^{(e)} + \mathbf{N}_{24}^{(e)}(x, y, z)E_{24}^{(e)} + \mathbf{N}_{34}^{(e)}(x, y, z)E_{34}^{(e)}, \end{aligned} \quad (4.17)$$

missä  $E_{lk}$  kuvaa sironnen sähkökentän tangentialikomponenttia solmujen  $l$  ja  $k$  yhdistävässä särmässä elementissä  $e$ .  $\mathbf{N}_{lk}^{(e)}$  on vastaava kantafunktio. Särmäelementillä on nollasta poikkeava tangentialikomponentti vain niitä vastaavissa särmissä. Tämän vuoksi interpoloitavalla funktiolla eli sironneella sähkökentällä on jatkuva tangentialikomponentti materiaalirajapinnan yli, mutta normaali komponentti voi olla epäjatkuva.

Sironnut sähkökenttä  $\mathbf{E}_s$  lasketaan tehtäväalueessa  $V \cup V_c$  kaavalla

$$\mathbf{E}_s = \sum_{j=1}^{N_{\text{edge}}} \mathbf{N}_j E_j, \quad (4.18)$$

missä  $N_{\text{edge}}$  on särmien lukumäärä,  $E_j$  on särmän  $j$  sironnen sähkökentän tangentialikomponentti ja  $\mathbf{N}_j$  on vastaava vektoriaalinen kantafunktio. Sijoitetaan (4.18) kaavaan (4.15), jolloin saadaan

$$\sum_{j=1}^{N_{\text{edge}}} K_{ij} E_j = b_i \quad i = 1, 2, \dots, N_{\text{edge}}, \quad (4.19)$$

missä systeemimatriisi  $K$  ja lähdevektori  $b$  lasketaan kaavoilla

$$\begin{aligned} K_{ij} = & \int_{V \cup V_c} \left[ \frac{1}{\mu} (\nabla \times \mathbf{N}_i) \cdot (\nabla \times \mathbf{N}_j) - \omega^2 \epsilon \mathbf{N}_i \cdot \mathbf{N}_j \right] d\Omega \\ & - \oint_{\partial V_\infty} i\omega \sqrt{\frac{\epsilon}{\mu}} (\mathbf{n} \times \mathbf{N}_i) \cdot (\mathbf{n} \times \mathbf{N}_j) dS, \end{aligned} \quad (4.20)$$

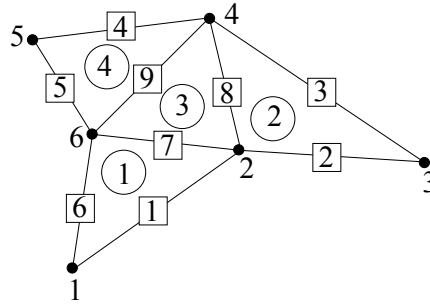
$$b_i = - \int_V \mathbf{N}_i \cdot \omega^2 \left( \epsilon - \epsilon_c \frac{\mu_c}{\mu} \right) \mathbf{E}_{\text{inc}} d\Omega. \quad (4.21)$$

Tämä voidaan kirjoittaa kompaktisti matriisimuodossa

$$KE = b, \quad (4.22)$$

josta voidaan ratkaista kertoimet  $E$ . Tämän jälkeen sironnut sähkökenttä tehtäväalueessa saadaan kaavasta (4.18).

Tarkastellaan vielä lähemmin systeemimatriisin  $K$  kokoamista. Otetaan tarkasteluun vain kaavan (4.20) ensimmäinen termi. Yksinkertaisuuden vuoksi oletetaan kaksiulotteinen verkko, jonka elementit ovat kolmioita. Numeroidaan kolmioiden särmät



**Kuva 4.3:** Esimerkkiverkko, missä solmuilla, elementeillä ja särmillä on globaalit numeroinnit.

**Taulukko 4.1:** Särmien globaali numerointi.

$e$	$ne(1,2;e)$	$ne(1,3;e)$	$ne(2,3;e)$
1	6	7	1
2	8	3	2
3	9	8	7
4	5	4	9

myötäpäivään. Valitaan solmuille, särmille ja kolmioille numeroinnit (ks. taulukko 4.1 ja kuva 4.3). Määritellään elementtien ja särmien välinen numerointi  $ne(l, k; e)$ , joka on sen särmän numero, joka liittyy elementissä  $e$  solmut  $l$  ja  $k$  toisiinsa.

Laskemalla kaavan (4.20) ensimmäisen termin osuus systeemimatriisiin  $K$

$$K_{lk;l'k'}^{(e)} = \int_{\Omega} \left[ \frac{1}{\mu} (\nabla \times \mathbf{N}_{lk}) \cdot (\nabla \times \mathbf{N}_{l'k'}) - \omega^2 \epsilon \mathbf{N}_{lk} \cdot \mathbf{N}_{l'k'} \right] d\Omega, \quad (4.23)$$

missä  $l < k$  ja  $l' < k'$ . Kun  $K_{lk;l'k'}$  on laskettu, se lisätään termiin  $K_{ij}$ , jossa  $i = ne(l, k; e)$  ja  $j = ne(l', k'; e)$ .

Lopulta kootaan systeemimatriisi, jolla on mm. seuraavat nollasta poikkeavat elementit:

$$K_{11} = K_{23;23}^{(1)}, \quad K_{23} = K_{23;13}^{(2)} \quad (4.24)$$

$$K_{77} = K_{13;13}^{(1)} + K_{23;23}^{(3)}, \quad K_{78} = K_{23;13}^{(3)}. \quad (4.25)$$

Loput matriisista  $K$  kootaan vastaavasti. Lisäksi kaavan (4.20) toisen termin osuus pitää ottaa huomioon. Myös vektori  $b$  pitää koota. Tämä tapahtuu vastaavasti kuin systeemimatriisiin  $K$  kokoaminen ottaen huomioon että indeksejä on vähemmän.

Kolmiulotteisessa tapauksessa tetraedrille pitää aluksi valita jokin suunnistus, jonka jälkeen matriisiin  $K$  ja vektorin  $b$  kokoaminen tapahtuu vastaavasti kuin kak-

siulotteisessa tapauksessa.

Integraali (4.23) pitää evaluoida analyttisesti tai numeerisesti. Analyttisesti integraali tetraedrin sisällä saadaan seuraavaan muotoon

$$\iiint_{V^{(e)}} (N_1^{(e)})^l (N_2^{(e)})^m (N_3^{(e)})^n (N_4^{(e)})^p d\Omega = \frac{l!m!n!p!}{(l+m+n+p+3)!} 6V^{(e)} \quad (4.26)$$

olettaen, että permittiivisyys ja permeabiliteetti ovat elementin sisällä vakioita. Silloin, kun ne eivät ole, kaavaa voidaan käyttää approksimoimalla niitä vakioina valittujen elementtien sisällä. Tämä vaatii tavallista tiheämmän verkon silloin, kun sirottajat ovat epähomogeenisia. [40]

### 4.3 Kantafunktiot

Edellä esiteltyt särmäelementit, joista käytetään myös nimitystä *Nedélec*, *Whitney* ja *Bossavit* elementit [57], pakottavat vain sähkökentän tangentialikomponentit jatkuviksi väliaineiden rajapinnoilla. Kantafunktioita sanotaan myös *roottoriyhteensopiviksi* (engl. *curl-conforming*), sillä kantafunktioiden roottori on määritelty kaikkialla.

Sironneen sähkökentän tangentialikomponenttien jatkuvuus takaa sen, että myös magneettivuontiheyden  $\mathbf{B}$  normaalikomponentti on jatkuva väliainerajapinnoilla, mikä seuraa yhtälöstä (2.5). Sähkövuontiheyden  $\mathbf{D}$  normaalikomponentissa ja magneettikentän  $\mathbf{H}$  tangentialikomponentissa voi silti olla paikoittaisia hyppyjä. Formuloimalla sironnatehtävä sironneelle magneettikentälle  $\mathbf{H}_s$ , saadaan magneettikentän tangentialikomponentin jatkuvuus ja sähkövuontiheyden normaalikomponentin jatkuvuus toteutumaan väliainerajapinnoilla, mutta vastaavat ehdot eivät tarkalleen ottaen toteudu sähkökentälle ja magneettivuontiheydelle. Lisäksi voitaisiin vaatia yhtä aikaa sekä sironneen sähkö- ja magneettikentän Helmholtz-yhtälöt, jolloin kenttien käyttäytyminen väliaineiden rajapinnoilla on taattu. Tällöin väliainerayhtälöt eivät kuitenkaan välttämättä toteudu, sillä sähkö- ja magneettikentät on ratkaistu likiarvoisesti omista yhtälöistään, jotka ovat riippumattomia toisistaan. Valitsemalla roottoriyhteensopivat kantafunktiot taataan Gaussin laki sähkövuontiheydelle ilman, että sitä pitää erikseen painottaa. Tämä ei toteudu automaattisesti Helmholtz-formulaatiossa. [58]

Erityisesti *heksaedriset särmäelementit* ovat ominaisuuksiltaan hyviä, sillä ne eivät johda vapausasteiden lisääntymiseen [59]. Särmäelementit estävät useimmissa tilanteissa epäfysikaalisten muotojen syntymisen (engl. *spurious modes*) [60–62], joita esiintyy helposti solmuelementeilla. Nämä epäfysikaaliset muodot rikkovat Gaussin lain [57]. Lisäksi särmäelementit mallintavat singulaarisuuksia hyvin [63].

Edellä mainitut kantafunktiot ovat ensimmäistä astetta. Valitettavasti ne eivät approksimoivat edes ensimmäisen asteen funktioita tarkasti [64], jolloin verkon täytyy

olla tiheä ennen kuin ratkaisu suppenee. Tämän vuoksi on kehitetty toisen asteen polynomeja sisältäviä kantafunktioita [65–70], jotka eivät vaadi yhtä tiheää verkkoa kuin ensimmäisen asteen kantafunktiot silloin, kun ratkaisu on hyvin sileä. Lisäksi on kehitetty myös korkeamman asteen  $p$  kantafunktioita [71], jotka pyrkivät interpoloimaan asteen  $p$  polynomia täydellisesti.

#### 4.4 Absorboivat reunaehdot

Sen lisäksi, että ääretöndimensioista avaruutta approksimoidaan äärellisdimensioisella aliavaruudella, ääretön tehtäväalue pitää esittää äärellisenä tehtäväalueena. Tämä vaatii reunaehdon tehtäväalueen reunalla. Sirontatehtävissä käytetään usein joko absorboivaa reunaehto (engl. *absorbing boundary condition*; ABC) [23] tai ns. sovituserrosta (engl. *perfectly matched layer*; PML) [72]. Näiden pitäisi emuloida mahdollisimman hyvin Silver–Müller-ehtoa, ja siten absorboida mahdollisimman paljon sironneista kentistä minimoiden *numeerisen heijastuksen* takaisin tehtäväalueeseen.

Yksinkertaisin ABC eli *matemaattinen reunaehto* on likiarvoinen Silver–Müller säteilyehto. Tämä johtaa täydelliseen absorptioon silloin, kun sironnut kenttä tulee kohtisuoraan reunalle. Kun sähkömagneettiset aallot tulevat suuressa kulmassa tehtäväalueen reunalle reunan normaalivektoriin nähden, tämä säteilyehto johtaa kuitenkin huomattavaan numeeriseen heijastukseen [40]. Tämän vuoksi tehtäväalueen pitää olla riittävän suuri, että kulmat olisivat riittävän pieniä. Korkeamman asteen absorboivat reunaehdot perustuvat vektorimuotoisen aaltoyhtälön vektorimuotoiseen kehitelmään [73, 74].

Matemaattisen reunaehdon sijaan mallinnusalueen reunalla voi olla myös absorboiva materiaali. Tämän kerroksen paksuutta, permittiivisyyttä, permeabiliteettia ja sähkönjohtavuutta säätämällä voidaan suunnitella sellainen kerros, joka ei juuri heijasta, mutta absorboi voimakkaasti. Absorption tulee olla sellainen, että sähkömagneettiset aallot vaimenevat merkittävästi, kun ne menevät kerroksen läpi ja heijastuvat kerroksen ulkoreunalta takaisin tehtäväalueeseen. PML on tällainen materiaali. Se on teoreettisesti heijastamaton kaikille tasoaalloille. Alun perin PML implementoitiin epäfysikaalisella *kentät separoivalla formulaatiolla* (engl. *split field formulation*) [75, 76]. Myöhemmin se implementoitiin myös *skaalatuilla koordinaateilla* (engl. *stretched coordinates*) [55]. Vielä parempiin tuloksiin päästään, kun PML:ää tarkastellaan anisotrooppisena absorboivana väliaineena [77, 78], jonka permittiivisyys ja permeabiliteetti saadaan kertomalla alueen  $V_c$  permittiivisyys ja per-

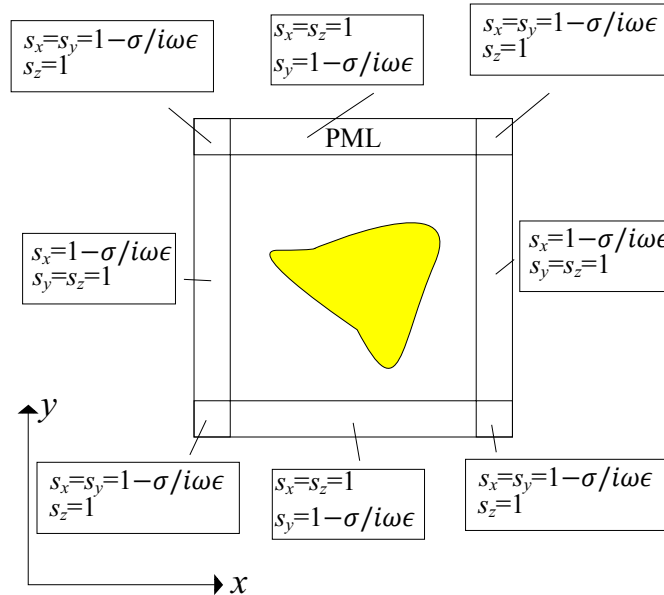
meablliliteetti matriisilla [79]

$$\Lambda = \begin{pmatrix} \frac{s_y s_z}{s_x} & 0 & 0 \\ 0 & \frac{s_z s_x}{s_y} & 0 \\ 0 & 0 & \frac{s_x s_y}{s_z} \end{pmatrix}, \quad (4.27)$$

missä symbolit  $s_x, s_y$  ja  $s_z$  on esitetty kuvassa 4.4. Heikossa muodossa (4.15) PML aiheuttaa sen, että termi  $(\nabla \times \mathbf{W}_i) \cdot (\nabla \times \mathbf{E}_s)$  korvataan termillä  $(\nabla \times \mathbf{W}_i) \cdot \Lambda^{-1} \cdot (\nabla \times \mathbf{E}_s)$  ja termi  $\mathbf{W}_i \cdot \mathbf{E}_s$  korvataan termillä  $\mathbf{W}_i \cdot \Lambda^{-1} \cdot \mathbf{E}_s$ .

PML on implementoitu myös sylinterin ja pallon tapauksissa [80, 81]. PML:n tarkkuutta voidaan parantaa asettamalla sen ulkoreunalle lisäksi absorboiva reunaehto [82]. Usein ongelmana ovat myös vaimenevat tasoaallot, joita PML ei sellaisenaan absorboi hyvin. Tätä varten PML voidaan muokata *CFS-PML*-muotoon (engl. *complex-frequency shifted PML*) [83, 84]. Käyttäessä PML:ää systeemimatriisin harvuus säilyy, mutta kunto huonontuu [85, 86].

Kolmas tapa on soveltaa integraaliyhtälöitä katkaisemaan tehtäväalue. Tämä johtaa yhdistettyyn elementtimenetelmä-reunaintegraalimenetelmään (FE-BI). Tämän menetelmän avulla tehtäväalue voidaan rajoittaa hyvin pienen pinnan sisään. Tällainen formulointi johtaa tarkkoihin reunaehtoihin. Tarkkuuden hintana ovat laskennallisesti työläämmät matriisit, sillä systeemimatriisin jotkin alimatriisit ovat



**Kuva 4.4:** Esimerkki tehtäväalueesta, joka on katkaistu PML:llä. Poikkileikkaus on otettu  $xy$ -tasossa  $z$ -akselin kohdassa, joka ei ole PML:n sisällä. Vastaavat poikkileikkaukset voidaan ottaa myös  $yz$ -tasossa ja  $zx$ -tasossa, jolloin komponenttien  $s_x, s_y$  ja  $s_z$  indeksejä pitää vaihtaa vastaavasti. PML:n nurkassa kaikki komponentit ovat  $1 - \frac{\sigma}{i\omega\epsilon}$ .

tiheitä. Ongelmaa voidaan lievittää nopeilla algoritmeilla, kuten *nopealla moninapakehitelmällä* (engl. *fast multipole method*) [87, 88].

## 4.5 Elementtimenetelmän tarkkuus

Elementtimenetelmässä verkon säännöllisyys parantaa usein ratkaisun laatua. Esimerkiksi, kun geometria on symmetrinen, kannattaa käyttää verkkoa, joka toteuttaa saman symmetrian. Tetraedrien sijaan voidaan käyttää myös kuutiomaisia elementtejä. Niiden tuottamassa verkossa on automaattisesti säännöllisyyttä. Tämä on eduksi esimerkiksi PML:ssä, sillä heksaedristen elementtien käyttö vähentää elementtien tarvetta.

Toisinaan mallinnettavat pinnat voivat olla hyvinkin kaarevia. Tällöin suorat särmät eivät välttämättä riitä kuvaamaan geometriaa riittävän hyvin, ja pitää ottaa käyttöön *isoparametriset elementit*, jotka ovat geometriselta esitykseltään samaa asetta kuin itse tarkasteltava geometria.

Elementtimenetelmässä pyritään optimoimaan laskuissa käytettävä verkko ja kantafunktioiden aste valitsemalla aluksi harva verkko. Tämän jälkeen tarkastellaan virhettä ja tiennetään verkkoa ja/tai valitaan korkeamman asteen kantafunktiot, ja toistetaan prosessi, kunnes virhe on riittävän pieni. Virhemitta konstruoidaan matemaattisesti elementtiformulaation ja tarkasteltavan suureen perusteella. Toisinaan konstruointi voi tapahtua myös fysikaalisen intuition perusteella. Tarkempi tarkastelu on tehty lähteissä [89, 90].

## 4.6 Lineaarisen yhtälöryhmän ratkaiseminen

Elementtimenetelmän numeerisen implementoinnin muisti- ja aikavaatimukset riippuvat matriisin kokoamisesta, matriisiyhtälön ratkaisemisesta ja matriisin esikäsittelystä.

Elementtimenetelmän tuottamat matriisit  $K$  (4.20) ovat ei-singulaarisia suuria kompleksiarvoisia matriiseja. Nollasta poikkeavia matriisin elementtejä on vain muutama prosentti, joten matriisi on harva. Tämä vähentää muistivaatimuksia suuruusluokasta  $\mathcal{O}(N^2)$  suuruusluokkaan  $\mathcal{O}(N)$  [57], missä  $N$  on elementtien lukumäärä. Matriisin *kuntoluku*, joka kuvaa ratkaisun herkkyyttä virheille matriisissa ja lähdevektorissa, voidaan 2-normin tapauksessa määritellä kaavalla

$$\kappa(K) = \frac{\sigma_{\max}(K)}{\sigma_{\min}(K)}, \quad (4.28)$$

jossa  $\sigma_{\max}$  ja  $\sigma_{\min}$  ovat matriisin  $K$  suurin ja pienin singulaariarvo [91]. Sirontatehtävissä kuntoluku on varsinkin korkeamman asteen kantafunktiolla usein suuri, jolloin pienikin virhe matriisissa tai lähdevektorissa vaikuttaa huomattavasti rat-



kaisuun [57]. Aikapolynomi eli matriisin kokoamiseen ja lineaarisen yhtälöryhmän ratkaisemiseen käytetty aika on sirontatehtävässä suuruusluokkaa  $\mathcal{O}(N)$  [28].

Matriisiyhtälön ratkaisemiseksi käytetään kahdentyyppisiä menetelmiä. Tämä vaikuttaa laskennalliseen tehokkuuteen, minkä vuoksi on tärkeää valita ratkaisumenetelmä, joka hyödyntää parhaiten matriisin ominaisuuksia. Matriisiyhtälön ratkaisumenetelmät jaotellaan *suoriin* ja *iteratiivisiin* ratkaisumenetelmiin.

Suorat ratkaisumenetelmät perustuvat usein Gaussiseen eliminaatioon tai LU-hajotelmaan [40, 79]. Näitä käytetään useimmiten tiheisiin matriiseihin, joissa suuri osa matriisin elementeistä poikkeaa nolasta. Suorat ratkaisumenetelmät ovat usein nopeita ja robusteja, mutta esimerkiksi LU-hajotelman tapauksessa hajotelman muodostaminen johtaa alkuperäistä tiheämpiin matriiseihin, mikä lisää muistivaatimuksia [57]. Esimerkkeinä elementtimenetelmän suorista ratkaisumenetelmistä ovat MUMPS (engl. *multifrontal massively parallel sparse direct solvers*) [92], PAR-DISO (engl. *Parallel Sparse Direct and Multi-Recursive Iterative Linear Solver*) [93] ja SPOOLES (engl. *SParse Object Oriented Linear Equations Solver*) [94]. Nämä tuottavat saman ratkaisun liukulukuaritmetiikkaa lukuunottamatta, mutta eroavat hieman muistivaatimuksiltaan ja nopeuksiltaan.

Iteratiiviset ratkaisumenetelmät luovat alkuarvauksen avulla jonon ratkaisuja. Parhaassa tapauksessa tämä jono suppenee kohti tarkkaa ratkaisua, mutta näin ei välttämättä aina käy. Iteratiiviset ratkaisumenetelmät vaativat vain vähän lisämuistia matriisin kokoamiseen nähden [79]. Huonona puolena iteratiivisissa menetelmissä on se, että ne saattavat vaatia suuren määrän askeleita ennen kuin iteraatio suppenee riippuen siitä, missä matriisin singulaariarvot sijaitsevat kompleksitasossa. Silloin, kun ne sijaitsevat lähellä toisiaan suppeneminen on yleensä nopeaa. Tämän ongelman ratkaisemiseksi iteratiivisissa menetelmissä käytetään usein esikäsittelematriiseja, jotka myös parantavat matriisin kuntoa. Esimerkiksi epätäydellisessä LU-hajotelmassa voidaan esikäsitellä systeemimatriisi [79]. Yleensä esikäsittelematriisin valintaan vaikuttavat tarkasteltava ongelma ja systeemimatriisin ominaisuudet. Iteratiivisia menetelmiä lineaarisen yhtälöryhmän ratkaisemiseksi ovat esimerkiksi *konjugaattigradienntimenetelmä* (engl. *conjugate gradients*; CG), *GMRES-menetelmä* (engl. *generalized minimal residual*) [95] sekä *stabiloitu bikonjugaattigradienntimenetelmä* (engl. *biconjugate gradient stabilized method*, BiCGSTAB) [96].

Edellä olevat iteratiiviset menetelmät ovat niin sanottuja Krylovin aliavaruusmenetelmiä [79], jotka käyttävät matriisien välisten kertolaskujen sijaan vähemmän työläitä matriisien ja vektorien välisiä kertolaskuja. Stabiloitu bikonjugaattigradienntimenetelmä perustuu *bikonjugaattimenetelmään* (engl. *biconjugate gradients*; BiCG), joka on variaatio konjugaattigradienntialgoritmistä [28]. Bikonjugaattigradienntimenetelmä soveltuu paremmin ei-symmetristen matriisien käsittelyyn, mutta suoriutuu silti yhtä hyvin symmetristen matriisien käsittelystä kuin konjugaattigra-

dienttimenetelmä [28]. Tämä johtuu siitä, että konjugaattigradienttimenetelmässä peräkkäisten jäännösvektorien jonoa ei voida ortogonalisoida epäsymmetrisen matriisin tapauksessa lyhyillä rekursioilla eli rekursioilla, joissa on korkeintaan muutama operaatio [97, 98]. Bikonjugaattigradienttimenetelmässä residuaalien ortogonaalinen jono korvataan kahdella keskenään ortogonaalisella jonolla sillä hinnalla, että menetelmä ei enää tarkalleen ottaen minimoi residuaalia. Toisaalta kantavektorien muodostaminen on laskennallisesti halpaa. Stabiloidussa bikonjugaattigradienttimenetelmässä iteraatio on nopeampaa ja suppeneminen sileämpää kuin alkuperäisessä bikonjugaattigradienttimenetelmässä [28].

## 5. TULOKSET

Tässä luvussa tutkitaan elementtimenetelmällä eri nanorakenteiden lineaarista optista vastetta. Ensin verrataan elementtimenetelmällä laskettuja tuloksia Mie-teorian ja reunaelementtimenetelmän antamia tuloksia pallomaisen hiukkasen tapauksessa. Lisäksi tarkastellaan substraatin vaikutusta sirontakuviioon eri fokusoiduilla säteillä. Käytetty substraatti on amorfinen piilasi (engl. *fused silica*). Tämän jälkeen mallinnetaan elementtimenetelmällä lineaarista vastetta nanolangoista. Pallon tapauksessa materiaalina on kulta, jonka taitekertoimena käytetään Johnsonin ja Christyn kokeellisesti mittaamaa dataa [35]. Nanolangan materiaalina on Gallium-Arsenidi (GaAs), jonka kristallirakenteeksi oletetaan zinc-blend. Kaikissa näissä tapauksissa ympäröivä väliaine on tyhjiö.

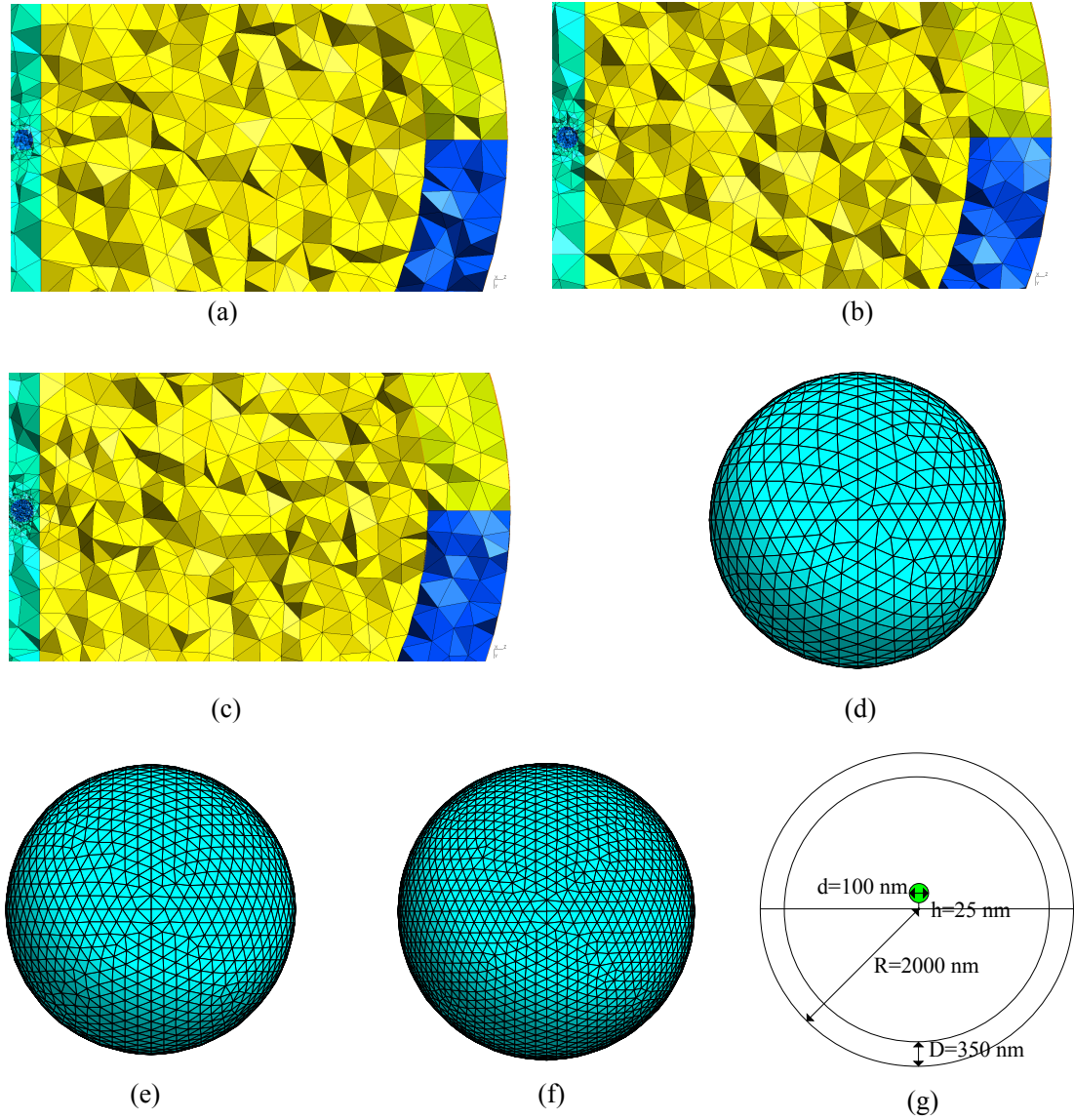
Elementtimenetelmä toteutettiin Comsol Multiphysics 5.0 ohjelmalla. Fokusoidut säteet implementoitiin Matlabilla, ja säteiden lausekkeet syötettiin Comsolille. Verkontiheydet pyrittiin valitsemaan siten, että yleispätevänä pidetty sääntö, jonka mukaan elementtejä on 10 aallonpituutta kohti, toteutuisi.

### 5.1 Pallo

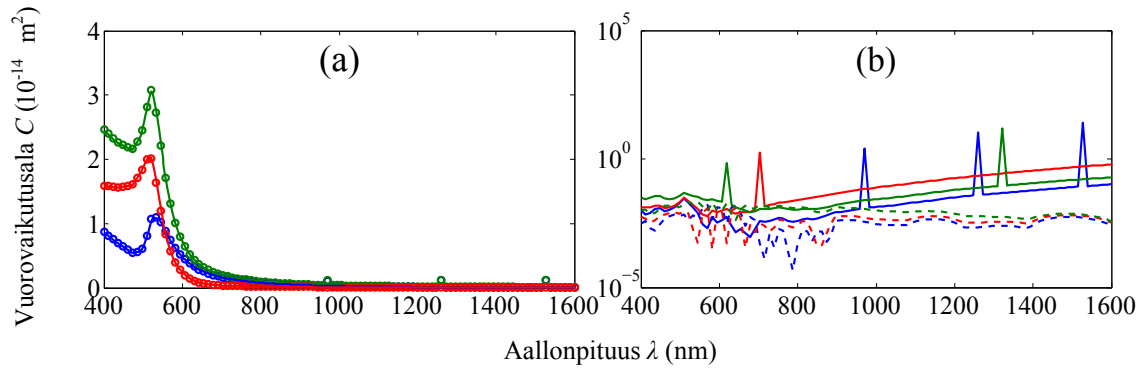
Sirontatehtävässä numeerisen menetelmän tarkkuutta voidaan mitata tarkastelemalla, miten tulokset lähestyvät Mie-teorian antamia tuloksia, kun verkon tiheyttä ja laatua lisätään. Lisäksi voitaisiin ottaa käyttöön korkeamman asteen kantafuntiot, mutta tässä tapauksessa pidetään yksinkertaisuuden vuoksi kantafunktioiden aste vakiona. Sirontatehtävässä Comsol käyttää oletuksena toisen asteen Nedélecin kantafunktioita.

Tarkastellaan palloa, jonka säde on 50 nm. Lasketaan  $x$ -polarisoituneella  $z$ -suuntaan etenevällä tasoaaltoherätteellä vuorovaikutusalat  $C_a$ ,  $C_s$  ja  $C_{\text{ext}}$  luvun 2.4 mukaisilla lausekkeilla. Integraalit lasketaan numeerisesti *Gaussisilla kvadratuureilla* [91]. Käytetään verkkoja  $M_1$ ,  $M_2$  ja  $M_3$ , joilla on tilavuuselementtejä 120677, 150501 ja 181470. Nämä on havainnollistettu kuvassa 5.1.

Kuvassa 5.2a on laskettu absorptio, sironnan ja ekstinktion vuorovaikutusalat Mie-teorialla ja elementtimenetelmällä. Noin 400 nm kohdalla näkyy häntä, joka liittyy bulkkimateriaalin energiavöiden väliseen absorptioon, eikä siten riipu sirottajan muodosta. Piikit liittyvät normaalimuotoihin, joita esiintyy pallolla [19]. Tässä työssä käytetyllä pallolla havaitaan yksi resonanssi aallonpituudella  $\lambda_1 = 520$  nm.



**Kuva 5.1:** (a)–(c) Elementtimenetelmän laskuissa käytetyt verkot  $M_1$ ,  $M_2$  ja  $M_3$ . (d)–(f) Reunaelementtimenetelmässä käytetyt verkot  $M_4$ ,  $M_5$  ja  $M_6$ . (g) Mallinnusalueen kaavio-kuva.

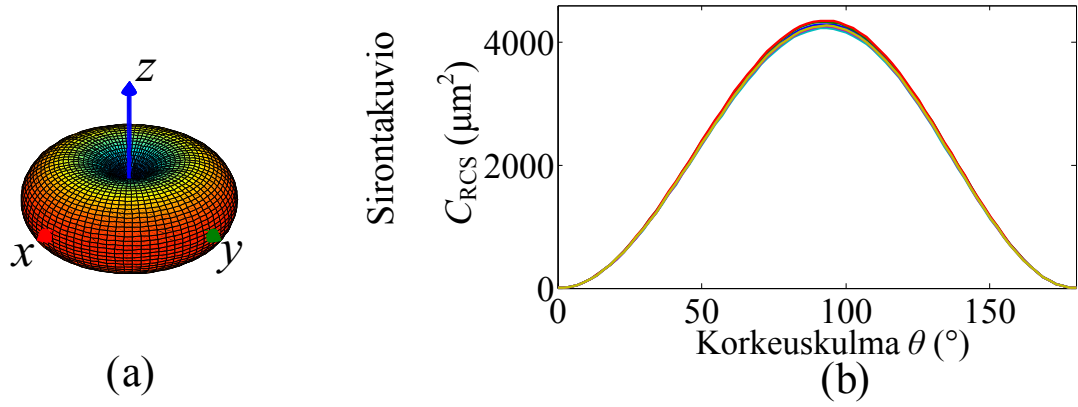


**Kuva 5.2:** Vuorovaikutusalat (a) ja niiden virheet (b). Kuvassa (a) on esitetty 50 nm pallon vuorovaikutusalat. Vihreä väri vastaa ekstinktion vuorovaikutusalaa  $C_{\text{ext}}$ , punainen väri absorption vuorovaikutusalaa  $C_a$  ja sininen väri sironnan vuorovaikutusalaa  $C_s$ . Yhtenäinen viiva esittää Mien teorian tuloksia ja ympyrät elementtimenetelmän tuloksia verkolla  $M_3$ . Kuvassa (b) on esitetty elementtimenetelmän aiheuttamaa virhettä vuorovaikutusalaloissa. Verkontiheyset tiheimmästä karkeimpaan ovat sininen, punainen ja vihreä. Yhtenäinen viiva kuvaa sironnan vuorovaikutusalan virhettä ja katkonainen viiva absorptio vuorovaikutusalan virhettä.

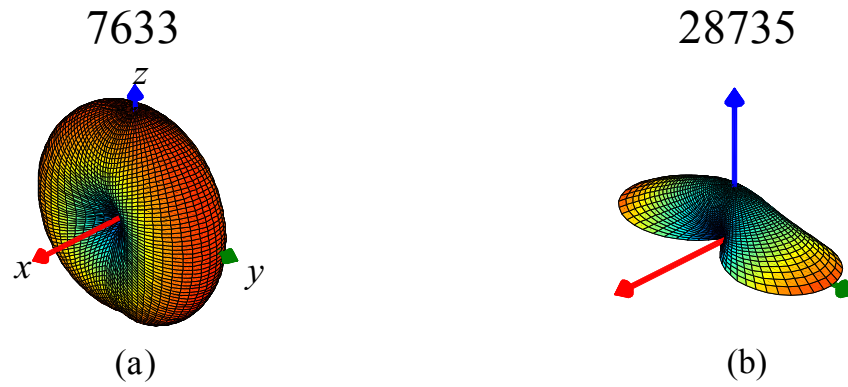
Tämä resonanssi liittyy dipolimutoon.

Kuvassa 5.2b tarkasteltiin vuorovaikutusalojen  $C_a$  ja  $C_s$  suhteellisten virheiden riippumista verkoista  $M_1, M_2$  ja  $M_3$ . Absorption vuorovaikutusalan virhe oskilloi pienillä aallonpituuksilla, mutta lopuksi saturoituu prosentin luokkaan. Virhe on useimmilla aallonpituuksilla pienin suurimmalla verkontiheydellä, mutta eri verkkojen virheet suppenevat kohti samaa arvoa, kun aallonpituusa kasvaa. Sironnan vuorovaikutusalojen käyttäytyminessään on piikkejä joillain aallonpituuksilla, mikä saatetaan johtua todennäköisesti systeemimatriisin heikosta kunnosta. Tämä johtuu osittain siitä, että reunaehtona toimii PML, joka johtaa usein heikkokuntoiseen systeemimatriisiin. Pienillä aallonpituuksilla myös sironnan vuorovaikutusalojen virhe oskilloi. Aallonpituuden kasvaessa virhe kasvaa tasaisesti kaikilla verkoilla. Virhe on suurilla aallonpituuksilla suurin verkolla  $M_2$ . Yleisesti absorption virhe on pienempi kuin sironnan.

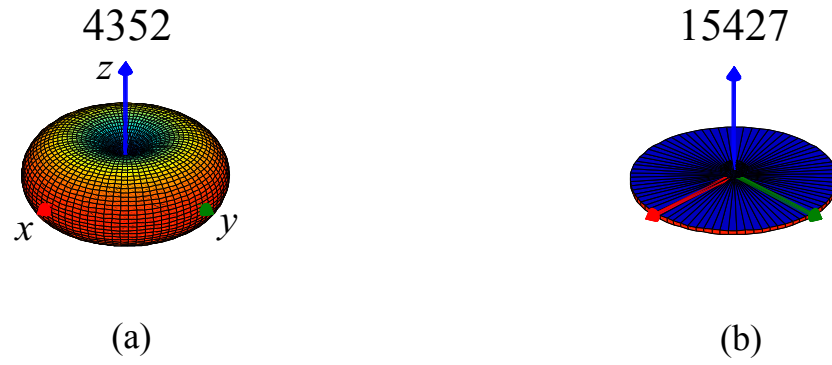
Kuvassa 5.3 on verrattu elementtimenetelmällä ja reunaelementtimenetelmällä laskettuja sirontakuvioita resonanssissa  $\lambda_1 = 520$  nm verkoilla  $M_1$ – $M_6$ . Herätteenä toimi fokusoitunut radiaalinen säde. Kuvasta 5.3a huomataan, että pallo sirotaa radiaalista sädettä voimakkaasti sivulle. Kuvasta 5.3b huomataan, että elementtimenetelmän ja reunaelementtimenetelmän antamat tulokset ovat hyvin lähellä toisiaan, mutta eivät saturoitu täysin samaan arvoon, mikä johtuu todennäköisesti siitä, että elementtimenetelmässä mallinnusalue on äärellinen, mikä rajoittaa verkontiheyden lisäksi ratkaisun tarkkuutta.



**Kuva 5.3:** (a) Sirontakuvio fokusoidulla radiaalisella säteellä. (b) Sirontakuvio atsimutaalikulmassa  $\phi = 0$ . Verkkoja  $M_1$ – $M_6$  vastaavat sininen, vihreä, punainen, vaaleansininen, violetti ja vaaleanruskea väri.



**Kuva 5.4:** Sirontakuvion fokusoidulla Gaussisella herätteellä. Kuvien yläpuolella näkyy sirontakuvion maksimiarvo. (a) Fokusointi ilman substraattia. (b) Fokusointi substraatin lähellä.



**Kuva 5.5:** Sirontakuvion fokusoidulla radiaalisella säteellä. Kuvien yläpuolella näkyy sirontakuvion maksimiarvo. (a) Fokusointi ilman substraattia. (b) Fokusointi substraatin lähellä.



**Kuva 5.6:** Sirontakuvion fokusoidulla atsimutaalisella säteellä. Kuvien yläpuolella näkyy sirontakuvion maksimiarvo. (a) Fokusointi ilman substraattia. (b) Fokusointi substraatin lähellä.

Kuvassa 5.4 on tutkittu resonanssiaallonpituudella sirontakuviota fokusoidulla Gaussisella säteellä. Havaitaan, että substraatin vaikutuksesta eteenpäin sironta vahvistuu. Erityisesti  $y$ -akselin suuntaan sironta on hyvin voimakasta. Kuvassa 5.5 on tutkittu resonanssiaallonpituudella sirontakuviota fokusoidulla radiaalisella säteellä. Sironta vahvistuu selvästi taaksepäin, minkä voi johtua voimakkaasta pitkitäissuuntaisesta komponentista. Kuvassa 5.6 on tutkittu resonanssiaallonpituudella sirontakuviota fokusoidulla atsimutaalisella säteellä. Eteenpäin sironnan muoto säilyy, kun mallinnetaan substraatti. Sironta on yhä pyörähdysymmetrinen, mutta voimakkaampaa eteen- kuin taaksepäin. Sironnan maksimi-arvo on hieman suurempi silloin, kun mallinnetaan substraatti. Sironta on kaikissa tapauksissa vahvempaa tapauksessa, jossa substraatti on mukana. Tästä voidaan päätellä, että tuleva ja heijastunut heräte interferoivat pallon kohdalla.

## 5.2 Nanolanka

Tässä alaluvussa tutkitaan puolijohdenanolanگان linearista optista vastetta ja selvitetään, miten vaste muuttuu, kun tulevan lasersäteen polttotason paikkaa muutetaan. Laskuissa ei oteta substraattia huomioon. Puolijohdenanolanگان tärkeimpiä ominaisuuksia ovat hyvälaatuinen kiderakenne [99, 100], epäisotropia polarisaation suhteen (engl. *polarization anisotropy*) [101], mikä tarkoittaa sitä, että sironnut valo on joissain määrin polarisoitunutta. Lisäksi korkea epälineaarinen vaste on yksi tärkeä ominaisuus [102]. Tämä johtuu yleensä pitkälti fokusoidun radiaalisen säteen pitkittäissuuntaisesta sähkökentänkomponentista [53].

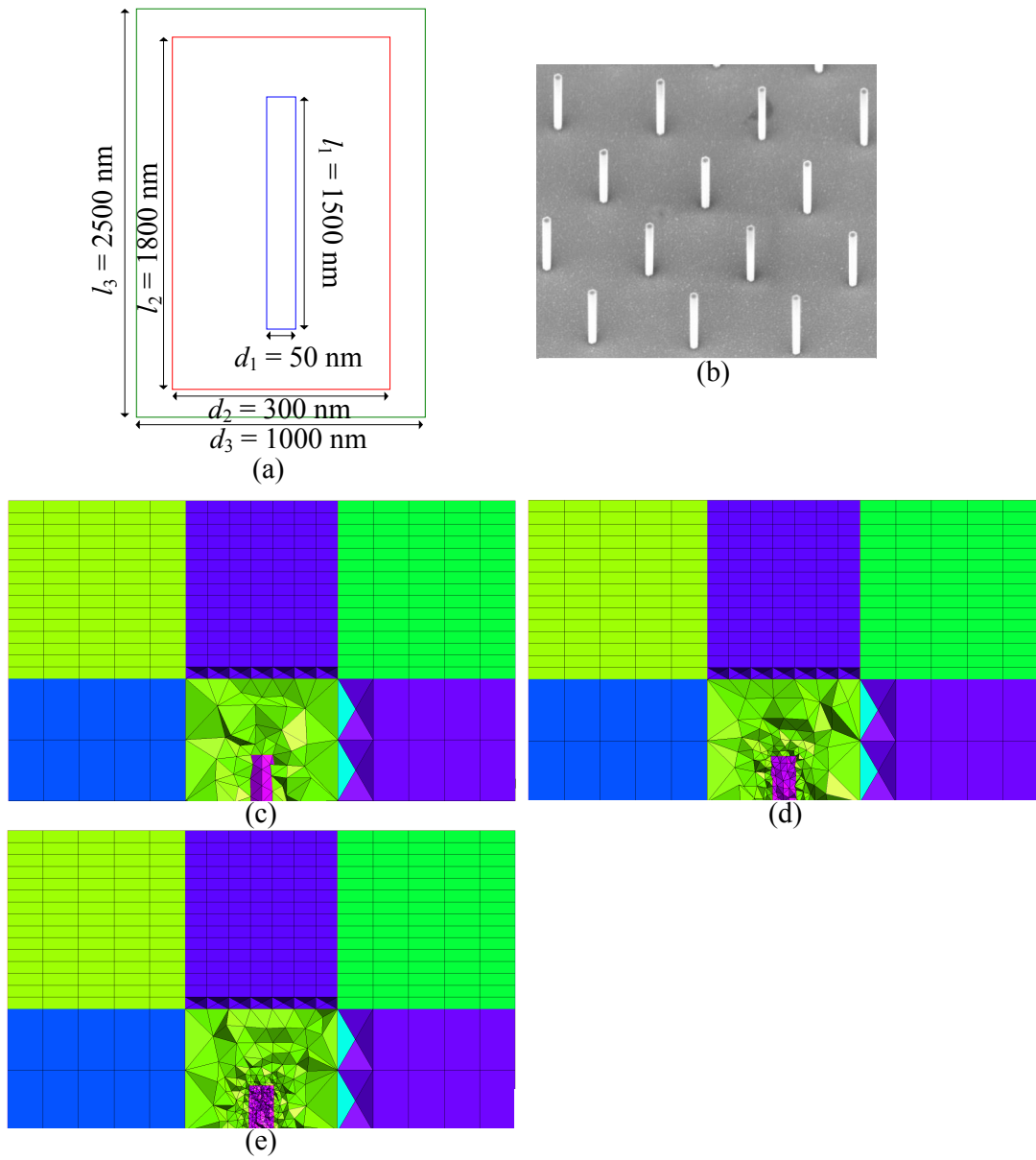
Tarkastellaan kolmella eri verkolla (kuva 5.7)  $z$ -suuntaan etenevien fokusoitujen säteiden sirontaa. PML:n ja häviöttämän väliaineen paksuudet on valittu riittävän suuriksi, joten niistä ei aiheudu merkittävästi virhettä. Myös numeerisen integroinnin tarkkuus oletetaan hyväksi. Nanolangoille ei ole olemassa tarkkoja tuloksia, joten tässä on tyydyttävä numeeriseen ratkaisuun.

Kuvassa 5.8 on lähikentän intensiteetti verkon  $L_3$  tapauksessa aallonpituudella  $\lambda = 1060$  nm nanolanگان lähistöllä polttotasossa. Ratkaisun tarkkuutta on tutkittu kuvassa 5.9 tutkimalla intensiteettiä  $x$ -akselilla.

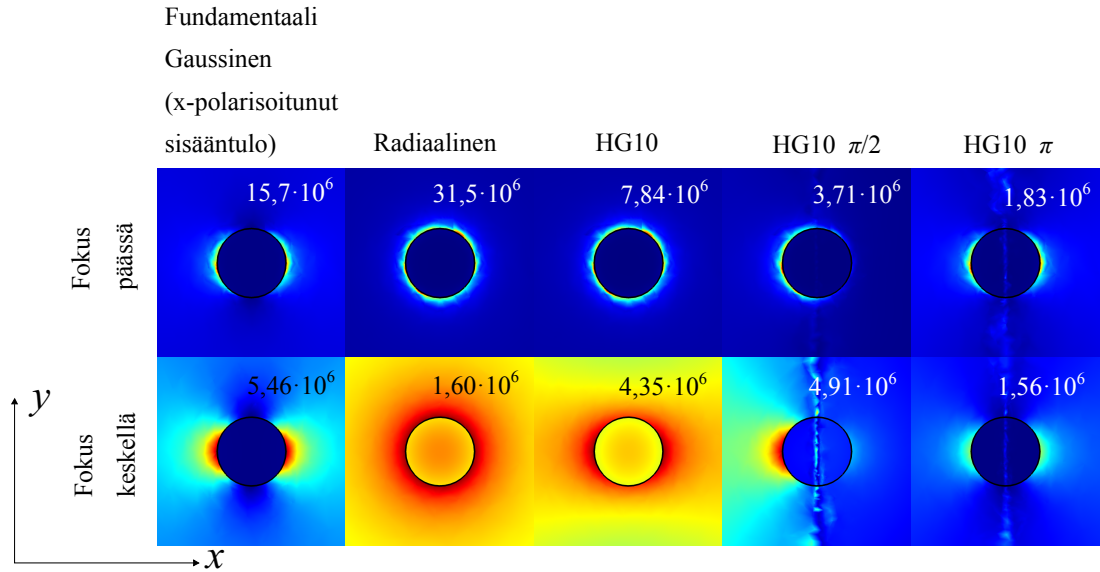
Kuvasta 5.8 voidaan päätellä, että radiaalinen polarisaatio aiheuttaa voimakkaimman lähikentän silloin, kun polttotaso on nanolanگان päässä. Nanolanگان päissä on terävät reunat. Ylärivin kuvioista voidaan päätellä, että aallonpituudella  $\lambda = 1060$  nm lähikenttä on Gaussisen säteen ja vaihesiirron  $\pi$  saaneen Hermite–Gaussisen säteen tapauksessa dipolimaista. Radiaalisella ja Hermite–Gaussisella säteellä lähikenttä on isotrooppinen. Vaihesiirron  $\pi/2$  saaneella Hermite–Gaussisella säteellä lähikenttään syntyy yksi napa.

Tapauksessa, jossa polttotaso on nanolanگان puolivälissä, havaitaan polttotasossa selkeämmin dipolit. Myös Hermite–Gaussisen säteen tapauksessa lähikenttä on

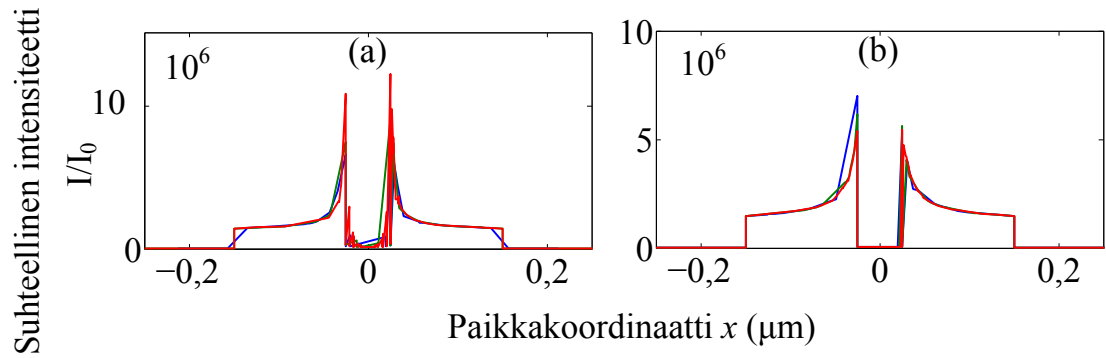




**Kuva 5.7:** (a) Nanolangan kaaviokuva. (b) SEM-kuva nanolangoista. (c)–(e) Laskuissa käytetyt verkot  $L_1$ – $L_3$ .



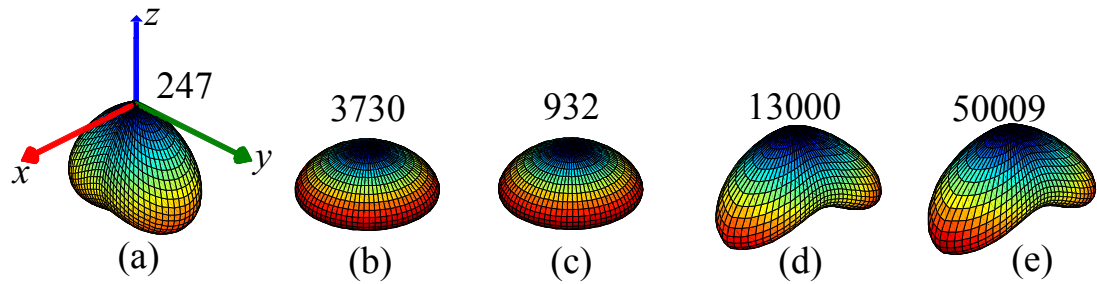
**Kuva 5.8:** Intensiteetti nanolangan ympäristössä erilaisten fokusoitujen säteiden tapauksissa. Ylemmällä rivillä polttotasoa ja pintoalue on nanolangan päässä  $z = 0$ , kun nanolanka kasvaa  $+z$ -suuntaan. Alemmalla rivillä polttotasoa ja pintoalue on nanolangan puolessavälissä.



**Kuva 5.9:** Intensiteetti  $x$ -akselin suuntaisella janalla polttotasossa herätteellä, joka saadaan, kun fokuroidaan  $x$ -polarisoitunut Gaussinen säde. Sininen väri vastaa verkkoa  $L_1$ , punainen väri verkkoa  $L_2$  ja vihreä väri verkkoa  $L_3$ . (a) fokus päässä, (b) fokus nanolangan puolessa välissä.

tässä tapauksessa dipolimainen. Vaihesiirron  $\pi/2$  saaneella Hermite–Gaussisella säteellä napa on vahvistunut. Vaihesiirron  $\pi/2$  ja  $\pi$  saaneilla Hermite–Gaussisilla säteillä on havaittavissa molemmissa tapauksissa kohinaa johtuen vaihehypyistä herätteen komponenteissa.

Kuvasta 5.9 havaitaan, että tulokset ovat kaikilla verkoilla hyvin lähellä toisiinsa Gaussisen säteellä sekä tapauksessa (a) fokusoitaessa nanolangan päähän että tapauksessa (b) fokusoitaessa nanolangan keskelle. Suurimmat erot tulevat piikin kohdalla johtuen verkon tarkkuuden lisäksi siitä, että Comsolissa lähikentän esittämiseen käytetyn tiedoston koko vaihtelee.

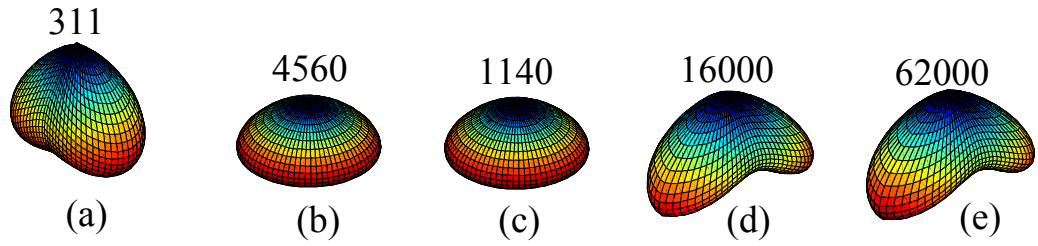


**Kuva 5.10:** Nanolangan sirontakuviot aallonpituudella  $\lambda = 1060$  nm, kun fokus osuu nanolangan päähän. Kuvissa (a)–(e) vasemmalta oikealle herätteet ovat Gaussinen, radiaalinen,  $HG_{10}$ ,  $HG_{10}$   $\pi/2$ :n vaihesiirrolla ja  $HG_{10}$   $\pi$ :n vaihesiirrolla. Tapauksessa, jossa polttotaso on nanolangan puolivälissä, sirontakuvio on melkein kaikissa tapauksissa heikompi. Kuvioden yläpuolelle on merkitty sirontakuvion maksimiarvo.

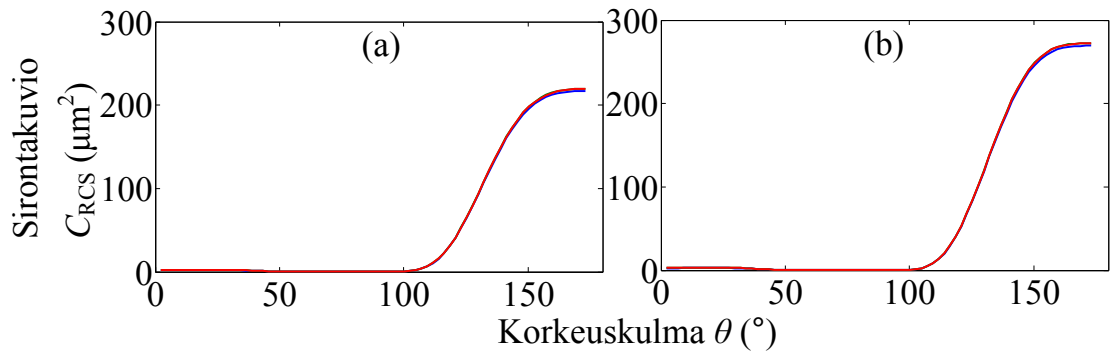
Nanolangan sirontakuviot samalla aallonpituudella on esitetty kuvissa 5.10 ja 5.11. Tarkkuuden arvioimiseksi suunnassa  $\phi = 0$  on esitetty  $x$ -polarisoituneen fokusoidun Gaussisen säteen aiheuttama sirontakuvio eri verkoilla.

Tarkasteltaessa kuvan 5.10 sirontakuvioita havaitaan, että vaihesiirretyt Hermite–Gaussiset säteet johtavat selkeästi vahvimpaan kaukokenttään. Mielenkiintoisin havainto on se, että Gaussisella säteellä (a) sironta on vahvinta  $y$ -suuntaan, mutta kuvissa (d) ja (e) sironta on vahvinta  $x$ -suuntaan. Kuvissa (b) ja (c) sironta on isotrooppista  $xy$ -tasossa, mutta vaihtelee  $z$ -akselin suhteen. Vertailemalla tuloksia kuvaan 5.11 havaitaan, että sirontakuvio on samanlainen kaikilla säteillä, mutta sironta on voimakkaampaa tapauksessa, jossa polttotaso on nanolangan puolivälissä.

Kuvasta 5.12 havaitaan, että verkon tihentyessä kaukokentän tarkkuus pysyy suunnilleen samana Gaussiselle säteelle. Voidaan päätellä, että tarkkuus on muillekin säteille hyvä.



**Kuva 5.11:** Nanolangan sirontakuviot aallonpituudella  $\lambda = 1060$  nm, kun fokus osuu nanolangan puoleenväliin. Kuvissa (a)–(e) ovat herätteet vastaavassa järjestyksessä kuin intensiteetille. Kuviodien yläpuolelle on merkitty sirontakuvion maksimiarvo.



**Kuva 5.12:** Sirontakuvio  $C_{\text{RCS}}$  atsimutaalisuunnassa  $\phi = 0$  aallonpituudella  $\lambda = 1060$  nm eri verkoilla. Sininen väri vastaa verkkoa  $L_1$ , punainen väri verkkoa  $L_2$  ja vihreä väri verkkoa  $L_3$ . (a) fokus päähän, (b) fokus nanolangan puoleenväliin.

## 6. YHTEENVETO

Työn tarkoitus oli ratkaista sähkömagneettinen sirontatehtävä likiarvoisesti lineaarisen optisen vasteen tapauksessa. Maxwellin yhtälöistä johdettiin ääretöndimensioinen sirontatehtävä, johon sovellettiin elementtimenetelmää tehtävän saattamiseksi äärellisdimensioiseksi ja lineaariseksi. Tämä mahdollistaa likiarvoisen ratkaisun löytämisen. Sirontatehtävässä huomioitiin myös se, että nanorakenteet voivat olla substraatin päällä. Substraatti johtaa herätteen heijastukseen ja taittumiseen substraatin rajapinnalta, mikä pitää huomioida sirontatehtävää ratkaistaessa. Myös kaukokentän laskeminen tapahtuu erilailla kuin silloin, kun substraattia ei mallinneta. Tällöin pitää löytää Greenin funktio myös heijastuneelle ja taittuneelle herätteelle. Mallinnusohjelmalla käytettiin Comsolia.

Herätteenä käytettiin tasoaallon lisäksi fokusoituja säteitä, kuten radiaalisesti polarisoitunutta sädettä, joka saadaan, kun laserista saatu heräte fokusoidaan linssin avulla. Radiaalisessa sädettä fokusoitaessa saadaan aikaan etenemissuuntaan osoittava sähkökentän komponentti, joka on hyödyllinen esimerkiksi optisissa loukuissa ja SHG:ssä. Lisäksi konfokaalimikroskopiassa fokusoitunut säde skannataan näytteen yli. Tämä johtaa korkealaatuisiin kuviin, sillä fokuksen ulkopuolinen informaatio voidaan poistaa. Silloin, kun mallinnetaan substraatti, fokuoitu säde pitää hajottaa kulmaspektriesityksen avulla tasoaaltoihin, joiden heijastumista ja taittumista tarkastellaan.

Menetelmää testattiin pallohiukkaselle laskemalla vuorovaikutusalat lähi - infrapuna - ja optisella taajuuksilla ja vertailemalla tuloksia vastaaviin Mie-teorian antamiin analyttisiin tuloksiin tasoaaltoherätteen tapauksessa. Lisäksi verrattiin sirontakuviota reunaelementtimenetelmällä saatuun tulokseen, kun herätteenä käytettiin radiaalisesti polarisoitunutta fokuoitunutta sädettä. Laskuissa käytettiin kolmea eri verkontiheyttä tarkastelemaan, miten tarkkoja tulokset ovat. Virhemarginaali saatiin molemmissa tapauksissa pieneksi. Lisäksi tarkasteltiin substraatin vaikutusta sirontakuvioon, kun herätteenä käytettiin fokuoituja säteitä. Havaittiin, että sirontakuvion muoto muuttuu merkittävästi käytetyllä aallonpituudella, kun substraattina toimii amorfinen piilasi. Kallan permittiivisyysdatana käytettiin Johnsonin ja Christyn mittaamia arvoja [35].

Menetelmää sovellettiin nanolangan optisen vasteen mallintamiseksi. Puolijohdenanolankoja on tutkittu viime vuosina muun muassa suuren epälineaarisen vas-

teen saannon vuoksi [53, 102]. Nanolangan materiaalina käytettiin Gallium- Arsenidia (GaAs), ja kiderakenteena oli zinc-blend, jolloin permittiivisyys on skalaari, kun vaste oletetaan lineaariseksi. Nanolangalle laskettiin lähikenttä ja sirontakuvio käyttäen herätteenä erilaisia fokusoituja vektorisäteitä käyttämällä elementtimenetelmässä kolmea eri verkontiheyttä, saatiin lähes samat tulokset. Eri verkontiheydet antoivat lähes samat tulokset.

Elementtimenetelmän tarkkuutta voitaisiin parantaa käyttämällä korkeamman asteen kantafunktioita, mikä saataa kuitenkin heikentää systeemimatriisin kuntolukua. Lisäksi voidaan hyödyntää geometrian symmetriaa verkkoa muodostaessa ja käyttää tetraedrin sijaan heksaedria vähentämään vapausasteita. Silloin, kun mallinnettavat pinnat ovat hyvin kaarevia, voitaisiin käyttää isoparametrisia elementtejä, jotka ovat geometriseltä esitykseltään samaa astetta kuin itse tarkasteltava geometria.

Elementtimenetelmällä voidaan mallintaa myös SHG:tä, pintavahvistettua Raman - sirontaa (engl. *Surface Enhanced Raman Scattering*; SERS) sekä jaksollisia rakenteita. Lisäksi voidaan ottaa huomioon useampikerroksinen substraatti. SHG:tä on mallinnettu nanohiukkasissa, jotka eroavat vain vähän pallomaisista nanohiukkasista [29, 103]. Myös sähköistä dipolia korkeamman asteen moninapavasteet on huomioitu. Mallinnettaessa jaksollisia rakenteita, pitää jaksollisia sivuja vastaavat reunaehdot korvata jaksollisilla reunaehdoilla. Mallinnettaessa useampikerroksista substraattia pitää käyttää monikerroksisen rakenteen Greenin funktioita kaukokenttää laskiessa [14] ja herätteen laskemisessa pitää muomioda heijastuminen ja taittuminen kaikilla väliainerajapinnoilla, mikä on mahdollista yleistetyillä Fresnel-kerrotoilla [14].

Tässä työssä käytettiin mallinnusohjelmana Comsolia, joka on elementtimenetelmään pohjautuva reuna- ja alkuarvotehtävien ratkaisija. Se soveltuu lukuisiin fyysikan ongelmiin, kuten mekaniikan ja sähköfysiikan ongelmiin. Sähkömagneettisessa sirontatehtävässä Comsol on erityisen helppokäyttöinen tilanteessa, jossa ei mallinnetta substraattia. Comsolin kotisivuilta löytyy valmis malli tähän, jossa on myös yksityiskohtainen ohjeistus siitä, miten mallia käytetään. Tilanne monimutkaistuu, kun halutaan käyttää tasoaallon sijaan herätteenä fokusoitunutta Gaussista sädetä. Käyttäjän tulee kirjoittaa näiden lausekkeet itse Matlabilla, ja syöttää antaa ne tämän jälkeen Comsolille. Substraatin tapauksessa piti huomioida se, että heräte heijastuu ja taittuu väliaineen rajapinnalta. Nämä komponentit tulee laskea itse ja syöttää tämän jälkeen Comsolille. Comsolissa pitää huomioida, että mallinnusalue pitää jakaa rajapinnan mukaan osiin. Substraatin tapauksessa kaukokentän laskemiseksi pitää kehittää oma työkalu. Tämä osoittautui niin haastavaksi, että piti hakea neuvoa Comsolin Suomen tuelta. Lopulta tämä kuitenkin onnistui.

# LÄHTEET

- [1] J. Maxwell. *A treatise on electricity and magnetism*. Macmillan and Co., London, United Kingdom, 1873.
- [2] B. E. A. Saleh and M. C. Teich. *Fundamentals of Photonics*. John Wiley & Sons, Inc., New Jersey, USA, 2007.
- [3] W. Demtröder. *Laser spectroscopy: basic concepts and instrumentation*. Springer-Verlag, Berlin, Germany, 2003.
- [4] C. K. Chen, T. F. Heinz, D. Ricard, and Y. R. Shen. Surface-enhanced second-harmonic generation and Raman scattering. *Physical Review B*, 27(4):1965–1978, 1983.
- [5] K. Kelly, E. Coronado, L. Zhao, and G. Schatz. The Optical Properties of Metal Nanoparticles: The Influence of Size, Shape, and Dielectric Environment. *Optics Letters*, 107(3):668–677, 2003.
- [6] O. Svelto. *Principles of lasers*. Plenum Press, New York, USA, 1998.
- [7] P. A. Franken, A. E. Hill, C. W. Peters, and G. Weinreich. Generation of Optical Harmonics. *Physical Review Letters*, 7(4):118–120, 1961.
- [8] M. W. Klein, M. Wegener, N. Feth, and S. Linden. Experiments on second- and third-harmonic generation from magnetic metamaterials. *Optics Express*, 15(8):5238–5247, 2007.
- [9] M. W. Klein, C. Enkrich, M. Wegener, and S. Linden. Second-Harmonic Generation from Magnetic Metamaterials. *Science*, 313(5786):502–504, 2006.
- [10] F. B. P. Niesler, N. Feth, S. Linden, and M. Wegener. Second-harmonic optical spectroscopy on split-ring-resonator arrays. *Optics Letters*, 36(9):1533–1535, 2011.
- [11] R. W. Boyd. *Nonlinear Optics*. Academic Press, Amsterdam, Netherlands, 2008.
- [12] S. Kujala. *Optical second-harmonic generation from metal nanostructures*. PhD thesis, Tampere University of Technology, 2008.
- [13] S. C. Tidwell, D. H. Ford, and W. D. Kimura. Generating radially polarized beams interferometrically. *Applied Optics*, 29(15):2234–2239, 1990.

- [14] L. Novotny and B. Hecht. *Principles of Nano-optics*. Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom, 2007.
- [15] A. Ashkin. History of Optical Trapping and Manipulation of Small-Neutral Particle, Atoms, and Molecules. *IEEE Journal on Selected Topics in Quantum Electronics*, 6(6):841–856, 2000.
- [16] E. Yew and C. Sheppard. Second harmonic generation polarization microscopy with tightly focused linearly and radially polarized beams, *Optics Communications*, 275(2):453–457, 2007.
- [17] J. B. Pawley. *Handbook of Biological Confocal Microscopy*. Springer, Berlin, Germany, 2006.
- [18] G. Mie. Beitrage zur optik truber medien, speziell kolloidaler metallosungen. *Annalen der Physik*, 330(3):377–445, 1908.
- [19] C. F Bohren and D. R. Huffman. *Absorption and Scattering of Light by Small Particles*. Wiley, New York, USA, 1998.
- [20] R. F. Harrington. *Field Computation by Moment Methods*. Wiley-IEEE Press, New Jersey, USA, 1993.
- [21] W. C. Gibson. *Method of moments in electromagnetics*. Chapman & Hall/CRC Taylor & Francis Group, Boca Raton, USA, 2008.
- [22] K. S. Yee. Numerical solution of initial boundary value problems involving Maxwell’s equations in isotropic media. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 14(3):302–307, 1966.
- [23] A. Taflove and S. C. Hagness. *Computational electrodynamics: the finite-difference time-domain method*. Artech House Antennas And Propagaion Library, Boston, USA, 2005.
- [24] I. D. Mayergoyz. *Plasmon resonances in nanoparticles*. World Scientific, New Jersey, USA, 2013.
- [25] R. L. Courant. Variational methods for the solution of problems of equilibrium and vibration. *Bulletin of the American Mathematical Society*, 49(1):1–23, 1943.
- [26] P. P. Silvester. Finite element solution of homogeneous waveguide problems. *Alta Frequenza*, 38(1):313–317, 1969.



- [27] K. K. Mei. Unimoment method of solving antenna and scattering problems. *IEEE Transactions on Antennas Propagation*, 22:760–766, 1974.
- [28] J. Volakis, A. Chatterjee, and Kempel. L. *Finite Element Method Electromagnetics: Antennas, Microwave Circuits, and Scattering Applications*. Wiley-IEEE Press, Oxford, United Kingdom, 1998.
- [29] G. Bachelier, J. Butet, I. Russier-Antoine, C. Jonin, E. Benichou, and P.-F. Brevet. Origin of optical second-harmonic generation in spherical gold nanoparticles: Local surface and nonlocal bulk contributions. *Physical Review B*, 82:235403–235407, 2010.
- [30] J.-M. Jin. *The Finite Element Method in Electromagnetics*. Wiley-IEEE Press, New Jersey, USA, 2014.
- [31] X. Yuan. Three-Dimensional Electromagnetic Scattering from Inhomogeneous Objects by the Hybrid Moment and Finite Element Method. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, 38(8):1053–1058, 1990.
- [32] K. Sendur, W. Challener, and Mryasov O. Interaction of spherical nanoparticles with a highly focused beam of light. *Optics Express*, 16(5):2874–2886, 2008.
- [33] J. D. Jackson. *Classical electrodynamics*. John Wiley & Sons, Inc., Berkeley, USA, 1999.
- [34] U. Kreibig. Electronic properties of small silver particles: the optical constants and their temperature dependence. *Journal of Physics F*, 4:999–1014, 1974.
- [35] P. B. Johnson and R. W. Christy. Optical constants of the noble metals. *Physical Review B*, 6(12):4370–4379, 1972.
- [36] J. Mäkitalo, S. Suuriniemi, and M. Kauranen. Modes and resonances of plasmonic scatterers. *Physical Review B*, 89(165429):1–11, 2014.
- [37] P. Raunonen. *Mathematical Structures for Dimensional Reduction and Equivalence Classification of Electromagnetic Boundary Value Problems*. PhD thesis, Tampere University of Technology, 2009.
- [38] M. Ó. Searcóid. *Metric Spaces*. Springer-Verlag, London, UK, 2006.
- [39] A. Buffa, R. Hiptmair, and T. Petersdorff. Boundary element methods for Maxwell transmission problems in Lipschitz domains. *Numerische Mathematik*, 95:459–485, 2003.

- [40] J. Jin. *Theory and Computation of Electromagnetic Fields*. Wiley-IEEE PReSS, New Jersey, USA, 2010.
- [41] D. Colton and R. Kress. *Inverse acoustic and electromagnetic scattering theory*. Springer-Verlag, New York, USA, 1998.
- [42] R. G. Newton. Optical theorem and beyond. *American Journal of Physics*, 44:639–642, 2003.
- [43] D. R. Lytle II, P. S. Carney, J. C. Schotland, and E. Wolf. Generalized optical theorem for reflection, transmission, and extinction of power for electromagnetic fields. *Physical Review E*, 71(056610):1–8, 2005.
- [44] P. M. Morse and H. Feshbach. *Methods of theoretical physics part I*. McGraw-Hill Book Company, Inc., New York, USA, 1953.
- [45] K. D. Cole, J. V. Beck, A. Haji-Sheikh, and B. Litkouhi. *Heat Conduction Using Green’s Function*. CRC Press, Boca Raton, USA, 2011.
- [46] S. J. Orfanidis. *Electromagnetic waves and antennas*. 2008.
- [47] J. Stratton. *Electromagnetic Theory*. McGRAW-HILL, New York, USA, 1941.
- [48] A. M. Kern and O. J. F. Martin. Surface integral formulation for 3D simulations of plasmonic and high permittivity nanostructures. *Journal of the Optical Society of America A*, 26(4):732–740, 2009.
- [49] H. Kogelnik and Li. T. Laser beams and resonators. *Applied Optics*, 5:1550–1567, 1966.
- [50] E. Zauderer. Complex argument Hermite–Gaussian and Laguerre–Gaussian beams. *Journal of the Optical Society of America A*, 3:465–469, 1986.
- [51] V. G. Niziev, R. S. Chang, and A. V. Nesterov. Generation of inhomogeneously polarized laser beams by use of a Sagnac interferometer. *Applied Optics*, 45:8393–8399, 2006.
- [52] L. Mandel and E. Wolf. *Optical Coherence and Quantum Optics*. Cambridge University Press, New York, USA, 1995.
- [53] G. Bautista, J. Mäkitalo, Y. Chen, V. Dhaka, M. Grasso, L. Karvonen, H. Jiang, M. J. Huttunen, T. Huhtio, Lipsanen. H., and M. Kauranen. Second-Harmonic Generation Imaging of Semiconductor Nanowires with Focused Vector Beams. *Nano Letters*, 15:1564–1569, 2015.

- [54] G. Volpe, R. J. Molina-Terriza, G. Cherukulappurath, S. Parramon, and R. Quidant. Controlling the Optical Near Field of Nanoantennas with Spatial Phase-Shaped Beams. *Nano Letters*, 9(10):10, 2009.
- [55] W. C. Chew. *Waves and Fields in Inhomogeneous Media*. Van Nostrand Reinhold, New York, USA, 1990.
- [56] Reijo Kouhia. Kenttätehtävien numeeriset ratkaisumenetelmät. [http://webhotel2.tut.fi/mec\\_tme/?id=16/](http://webhotel2.tut.fi/mec_tme/?id=16/), September 2014.
- [57] D. B. Davidson. *Computational Electromagnetics for RF and Microwave Engineering*. Cambridge University Press, Cambridge, United Kingdom, 2005.
- [58] A. Bossavit and I. Mayergoyz. Edge-elements for scattering problems. *IEEE Transactions on Magnetics*, 25(4):2816–2821, 1989.
- [59] J. S. van Welij. Calculation of Eddy Currents in Terms of H on Hexaedra. *IEEE Transactions*, MAG-21(6):2239–2241, 1985.
- [60] K. Hayata, M. Koshiba, M. Eguchi, and M. Suzuki. Vectorial-Finite-Element Method Without Any Spurious Solutions for Dielectric Waveguiding Problems Using Transverse Magnetic-Field Component. *IEEE Transactions on Microwave Theory and Techniques*, MTT-34(11):1120–1124, 1986.
- [61] F. Kikuchi. Mixed and Penalty Formulations of an Eigenvalue Problem in Electromagnetism. *Computer Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 64:509–521, 1987.
- [62] J. P. Webb, G. L. Maile, and R. L. Ferrari. Finite-element solution of three-dimensional electromagnetic problems. *IEE Proceedings H*, 130(2):153–159, 1983.
- [63] J. P. Webb. Edge elements and what they can do for you. *IEEE Transactions on Magnetics*, 29:1460–1465, 1993.
- [64] J. P. Webb. Hierarchical Vector Basis Functions of Arbitrary Order for Triangular and Tetrahedral Finite Elements. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 47(8):1244–1253, 1999.
- [65] G. Mur. A finite-element method for computing three-dimensional electromagnetic fields in inhomogeneous media. *IEEE Transactions on Magnetics*, MAG-21(6):2188, 1985.

- [66] J. F. Lee. Analysis of passive microwave devices by using three-dimensional tangential vector finite elements. *International Journal of Numerical Modeling: Electronic Networks (Devices and Fields)*, 3(4):235–246, 1990.
- [67] J. F. Lee, D. K. Sun, and Z. J. Cendes. Full-wave analysis of dielectric waveguides using tangential vector finite elements. *IEEE Transactions on Microwave Theory Technology*, 39:1262–1271, 1991.
- [68] J. P. Webb and B. Forghani. Hierarchical scalar and vector tetrahedra. *IEEE Transactions on Magnetics*, 29:1495–1498, 1993.
- [69] A. Ahagon and T. Kashimoto. Three-dimensional electromagnetic wave analysis using high order edge elements. *IEEE Transactions on Magnetics*, 21:1753–1756, 1995.
- [70] A. Kameari. Symmetric second order edge elements in triangles and tetrahedrons. *Eighth Biennial IEEE Conference on Electromagnetic Field Computation*, Tucson, USA, 1998.
- [71] J. C. Nedelec. Mixed elements in R3. *Numerische Mathematik*, 35:315–341, 1980.
- [72] J.-P. Berenger. Three-Dimensional Perfectly Matched Layer for the Absorption of Electromagnetic Waves. *Journal of Computational Physics*, 127(0181):363–379, 1996.
- [73] A. F. Peterson. Absorbing boundary conditions for the vector wave equation. *Microwave and Optical Technology Letters*, 1(2):62–64, 1988.
- [74] J. P. Webb and V. N. Kannellopoulos. Absorbing boundary conditions for the finite element solution of the vector wave equation. *Microwave and Optical Technology Letters*, 2(10):370–372, 1989.
- [75] J.-P. Berenger. A perfectly matched layer for the absorption of electromagnetic waves. *Journal of Computational Physics*, 114(2):185–200, 1994.
- [76] D. S. Katz, E. T. Thiele, and A. Taflov. Validation and extension to three dimensions of the Berenger PML absorbing boundary condition for FD-TD meshes. *IEEE Microwave and Guided Wave Letters*, 4:268–270, 1994.
- [77] W. C. Sacks, D. M. Kingsland, R. Lee, and Leem J.-F. A perfectly matched anisotropic absorber for use as an absorbing boundary condition. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 43:1460–1463, 1995.

- [78] S. D. Gedney. An anisotropic perfectly matched layer absorbing medium for the truncation of FDTD lattices. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 44:1630–1639, 1996.
- [79] J. Jin and D. J. Riley. *Finite Element Analysis of Antennas and Arrays*. Wiley-IEEE Press, New Jersey, USA, 2009.
- [80] W. C. Chew, J. M. Jin, and E. Michielssen. Complex coordinate stretching as a generalized absorbing boundary condition. *Microwave and Optical Technology Letters*, 15(6):363–369, 1997.
- [81] A. D. Greenwood and J. M. Jin. A novel efficient algorithm for scattering from a complex BOR using vector FEM and cylindrical PML. *IEEE Transaction on Antennas and Propagation*, 47(4):620–629, 1999.
- [82] J. M. Jin and W. C. Chew. Combining PML and ABC for finite element analysis of scattering problems. *Microwave and Optical Technology Letters*, 12(4):192–197, 1996.
- [83] M. Kuzuoglu and R. Mittra. Frequency dependence of the constitutive parameters of causal perfectly anisotropic absorbers. *IEEE Microwave and Guided Wave Letters*, 6(12):447–449, 1996.
- [84] J. A. Roden and S. D. Gedney. Concolution PML (CPML): an effient FDTD implementation of the CFS-PML for arbitrary media. *Microwave and Optical Technology Letters*, 27(52):334–339, 2000.
- [85] J.-Y. Wu, D. M. Kingsland, J.-F. Lee, and R. Lee. A comparison of anisopropic PML to Berenger’s PML and its application to the finite-element method for EM scattering. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 45(1):40–50, 1997.
- [86] C. T. Wolfe, U. Navsariwala, and S. D. Gedney. A parallel finite element tearing and interconnecting algorithm for solution of the vector wave equation with PML absorbing medium. *IEEE Transactions on Antennas and Propagation*, 48(2):278–284, 2000.
- [87] R. Coifman, V. Rokhlin, and S. Wandzura. The fast multipole mathod for the wave equation; a pedestrian prescription. *IEEE Antennas and Propagation Magnetics*, 35:7–12, 1993.
- [88] W. C. Chew, J. M. Jin, E. Michielssen, and J. M. Song. *Fast and Efficient Algorithms in Computational Electromagnetics*. Artech House, Norwood, USA, 2001.

- [89] M. Ainsworth and J. T. Oden. A posteriori error estimation in finite element analysis. *Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 142:1–88, 1997.
- [90] J. T. Oden, L. Demkowicz, W. Rachowicz, and T. A. Westermann. Toward a universal  $h - p$  adaptive finite element strategy, part 2: A posteriori error estimation. *Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 77:113–180, 1989.
- [91] L. Elden, L. Wittmeyer-Koch, and H. B. Nielsen. *Introduction to numerical Computation-analysis and MATLAB illustrations*. Studentlitteratur, Lund, Sweden, 2004.
- [92] P. R. Amestoy, I. S. Duff, and L'Excellent. Multifrontal parallel distributed symmetric and unsymmetric solvers. *Computational Methods in Applied Mechanics and Engineering*, 184:501–520, 2000.
- [93] PARDISO 5.0.0 Solver Project. <http://www.pardiso-project.org/>.
- [94] SPOOLES 2.2 : SParse Object Oriented Linear Equations Solver . <http://www.netlib.org/linalg/spooles/spooles.2.2.html>.
- [95] Y. Saad and M. H. Schultz. A generalized minimal residual algorithm for solving nonsymmetric linear systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 7(3):856–869, 1986.
- [96] H. A. van der Vorst. BI-CGSTAB: A Fast and Smoothly Converging Variant of BI-CG for the Solution of Nonsymmetric Linear Systems. *SIAM Journal on Scientific and Statistical Computing*, 13(2):631–644, 1992.
- [97] V. Voevodin. The Problem of Non-Self-Adjoint Generalization of the Conjugate Gradient Method is Closed. *U.S.S.R. Computational Mathematics and Mathematical Physics*, 23:143–144, 1983.
- [98] V. Faber and T. Manteuffel. Necessary and Sufficient Conditions for the Existence of a Conjugate Gradient Method. *SIAM Journal on Numerical Analysis*, 21:315–339, 1984.
- [99] Y. Wu, R. Fan, and P. Yang. Block-by-Block Growth Single-Crystalline Si/-SiGe Superlattice Nanowires. *Nano Letters*, 2(2):83–86, 2002.
- [100] M. H. Huang, H. Mao, S. Feick, H. Yan, Y. Wu, H. Kind, E. Weber, R. Russo, and P. Yang. Room-temperature ultraviolet nanowire nanolasers. *Science*, 292(5523):1897–1899, 2001.

- [101] J. Wang and X. Cui-Y. Lieber C. M. Gudiksen, M. S. Duan. Highly polarized photoluminescence and photodetection from single indium phosphide nanowires. *Science*, 293(5534):1455–1457, 2001.
- [102] I. Shoji, T. Kondo, A. Kitamoto, M. Shirane, and R. Ito. Absolute scale of second-order nonlinear-optical coefficients . *Journal of the Optical Society of America B*, 14(9):2268–2294, 1997.
- [103] J. Butet, G. Bachelier, I. Russier-Antoine, C. Jonin, E. Benichou, and P.-F. Brevet. Interference between Selected Dipoles and Octupoles in the Optical Second-Harmonic Generation from Spherical Gold Nanoparticles. *Physical Review Letters*, 105:077401–1–077401–4, 2010.

## A. LIITTEITÄ

Esitetään fokusoitujen  $x$ -polarisoidun Gaussisen, radiaalisesti polarisoidun ja atsimutaalisesti polarisoidun säteiden lopulliset lausekkeet tapauksessa, jossa substraatti on lähellä fokusta. Esitys pohjautuu lukuun 3. Jokaiselle sähkökentän komponentille on oma funktionsa.

```
function E_x = mode00x_subs(x, y, z, omega, w0, f, alphamax, z0, n_subs,...
    n1, n2)
% Source code by Harri Mäntylä. Code is based on Novotny's book on
% Nano-optics, chapter 3. This gives the x-component of focused Gaussian
% beam which is x-polarized and propagates to z-direction. This is with
% substrate. The final equation for reflected and transmitted field are not
% given in Novotny's book. They are derived from 3.85 and 3.86.
% x, y, z: spatial coordinates,
% omega: angular frequency,
% w0: beam waist radius which is the same in Novotny's book.
% f: focal length of the pulse,
% alphamax: greatest possible angle of refracted
% beam wrt the optical axis. It is denoted by theta_max in Novotny's book.
% n1: index of refraction before the lens
% n2: index of refraction after the lens. They are denoted by the same
% symbols in
% Novotny's book.
% z0: place of the substrate wrt the focus.
% n_subs: index of refraction of substrate.

E_x = zeros(size(x));

% E0 is assumed to be 1.

n_factor = sqrt(n1./n2);
sin_amax = sin(alphamax);

% This is the filling factor given by eq. 3.55 in Novotny's book.
f_factor = w0./(f.*sin_amax);

% This is the wave number after the lens.
k = k_number(omega, n2);
[theta, r] = cart2pol(x, y);
```



```

% when z is bigger than the z0 it means that the point we are
% considering, is inside
% the substrate. Then the function returns the transmitted field in
% that point.
trans=find(z>z0);

% The following are based on integrals of 3.58 and 3.60. The
% difference is that eq. 3.83 is replaced with 3.88. and 3.84 is
% replaced with 3.86
if ~isempty(trans)

    int_00_t = I_00_t(f_factor(trans), sin_amax(trans), k(trans),...
    r(trans), z(trans), n2(trans), n_subs(trans), z0(trans));
    int_02_t = I_02_t(f_factor(trans), sin_amax(trans), k(trans),...
    r(trans), z(trans), n2(trans), n_subs(trans), z0(trans));
    E_x2t = (i.*k(trans).*f(trans).*n_factor(trans).*...
    exp(-i.*k(trans).*f(trans))/2).*(int_00_t+...
    cos(2*theta(trans)).*int_02_t);
    E_x(trans) = E_x2t;
end

% Otherwise we are considering a point in the air. Then the total field
% is the sum of incident and reflected electric fields.
% else

% The following are based on integrals of 3.58 and 3.60. The
% difference is that eq. 3.83 is replaced with 3.87. and 3.84 is
% replaced with 3.85.

refl=find(z<=z0);

if ~isempty(refl)
    int_00 = I_00(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl), r(refl),...
    z(refl));
    int_02 = I_02(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl), r(refl),...
    z(refl));
    int_00_r = I_00_r(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl),...
    r(refl), z(refl), n2(refl), n_subs(refl), z0(refl));
    int_02_r = I_02_r(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl),...
    r(refl), z(refl), n2(refl), n_subs(refl), z0(refl));
    E_x2 = (i.*k(refl).*f(refl).*n_factor(refl).*...
    exp(-i.*k(refl).*f(refl))/2).*(int_00+...
    cos(2*theta(refl)).*int_02);
    E_x2r = (i.*k(refl).*f(refl).*n_factor(refl).*...
    exp(-i.*k(refl).*f(refl))/2).*(int_00_r+...
    cos(2*theta(refl)).*int_02_r);

```

```

    E_x( refl ) = E_x2+E_x2r;
end
end

function E_y = mode00y_subs(x, y, z, omega, w0, f, alphamax, z0, n_subs,...
    n1, n2)
% Source code by Harri Mäntylä. Code is based on Novotny's book on
% Nano-optics, chapter 3. This gives the y-component of focused Gaussian
% beam which is x-polarized and propagates to z-direction. This is with
% substrate. The final equation for reflected and transmitted field are not
% given in Novotny's book. They are derived from 3.85 and 3.86.
% x, y, z: spatial coordinates,
% omega: angular frequency,
% w0: beam waist radius which is the same in Novotny's book.
% f: focal length of the pulse,
% alphamax: greatest possible angle of refracted
% beam wrt the optical axis. It is denoted by theta_max in Novotny's book.
% n1: index of refraction before the lens
% n2: index of refraction after the lens. They are denoted by the same
% symbols in Novotny's book.
% z0: place of the substrate wrt the focus.
% n_subs: index of refraction of substrate.

E_y = zeros(size(x));

% E0 is assumed to be 1.
n_factor = sqrt(n1./n2);
sin_amax = sin(alphamax);

% This is the filling factor given by eq. 3.55 in Novotny's book.
f_factor = w0./(f.*sin_amax);

% This is the wave number after the lens.
k = k_number(omega, n2);
[theta, r] = cart2pol(x, y);

% when z is bigger than the z0 it means that the point we are considering,
% is inside the substrate. Then the function returns the transmitted field
% in that point.
trans=find(z>z0);

% The following are based on integrals of 3.58 and 3.60. The
% difference is that eq. 3.83 is replaced with 3.88. and 3.84 is
% replaced with 3.86

```

```

if ~isempty(trans)
    int_02_t = I_02_t(f_factor(trans), sin_amax(trans), k(trans), ...
        r(trans), z(trans), n2(trans), n_subs(trans), z0(trans));
    E_y_t = (i.*k(trans).*f(trans).*n_factor(trans).*exp(-i.*...
        k(trans).*f(trans))/2).*(int_02_t.*sin(2*theta(trans)));
    E_y(trans) = E_y_t;
end

% Otherwise we are considering a point in the air. Then the total field
% is the sum of incident and reflected electric fields.
% else

% The following are based on integrals of 3.58 and 3.60. The
% difference is that eq. 3.83 is replaced with 3.87. and 3.84 is
% replaced with 3.85.

refl=find(z<=z0);

if ~isempty(refl)
    int_02 = I_02(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl), r(refl), ...
        z(refl));
    int_02_r = I_02_r(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl), r(refl), ...
        z(refl), n2(refl), n_subs(refl), z0(refl));
    E_y_0 = (i.*k(refl).*f(refl).*n_factor(refl).*exp(-i.*k(refl).*...
        f(refl))/2).*(int_02.*sin(2*theta(refl)));
    E_y_r = (i.*k(refl).*f(refl).*n_factor(refl).*exp(-i.*k(refl).*...
        f(refl))/2).*(int_02_r.*sin(2*theta(refl)));
    E_y(refl) = E_y_0+E_y_r;
end
end

function E_z = mode00z_subs(x, y, z, omega, w0, f, alphas_max, z0, n_subs, ...
    n1, n2)
% Source code by Harri Mäntylä. Code is based on Novotny's book on
% Nano-optics, chapter 3. This gives the z-component of focused Gaussian
% beam which is x-polarized and propagates to z-direction. This is with
% substrate. The final equation for reflected and transmitted field are not
% given in Novotny's book. They are derived from 3.85 and 3.86.
% x, y, z: spatial coordinates,
% omega: angular frequency,
% w0: beam waist radius which is the same in Novotny's book.
% f: focal length of the pulse,
% alphas_max: greatest possible angle of refracted
% beam wrt the optical axis. It is denoted by theta_max in Novotny's book.
% n1: index of refraction before the lens
% n2: index of refraction after the lens. They are denoted by the same

```

```

% symbols in Novotny's book.
% z0: place of the substrate wrt the focus.
% n_subs: index of refraction of substrate.

E_z = zeros(size(x));

% E0 is assumed to be 1.

n_factor = sqrt(n1./n2);
sin_amax = sin(alphamax);

% This is the filling factor given by eq. 3.55 in Novotny's book.
f_factor = w0./(f.*sin_amax);

% This is the wave number after the lens.
k = k_number(omega, n2);
[theta, r] = cart2pol(x, y);

% when z is bigger than the z0 it means that the point we are considering,
% is inside the substrate. Then the function returns the transmitted
% field in that point.

trans=find(z>z0);

% The following are based on integrals of 3.58 and 3.60. The
% difference is that eq. 3.83 is replaced with 3.88. and 3.84 is
% replaced with 3.86

if ~isempty(trans)
    int_01_t = I_01_t(f_factor(trans), sin_amax(trans), k(trans),...
        r(trans), z(trans), n2(trans), n_subs(trans), z0(trans));
    E_z2t = (i.*k(trans).*f(trans).*n_factor(trans).*exp(-i.*...
        k(trans).*f(trans))/2).*(-2*i*int_01_t.*cos(theta(trans)));
    E_z(trans) = E_z2t;
end

% Otherwise we are considering a point in the air. Then the total field
% is the sum of incident and reflected electric fields.
% else

% The following are based on integrals of 3.58 and 3.60. The
% difference is that eq. 3.83 is replaced with 3.87. and 3.84 is
% replaced with 3.85.

refl=find(z<=z0);

```

```

if ~isempty(refl)
    int_01 = I_01(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl), r(refl),...
        z(refl));
    int_01_r = I_01_r(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl), r(refl),...
        z(refl), n2(refl), n_subs(refl), z0(refl));
    E_z2 = (i.*k(refl).*f(refl).*n_factor(refl).*exp(-i.*k(refl).*...
        f(refl))/2).*(-2*i*int_01.*cos(theta(refl)));
    E_z2r = (i.*k(refl).*f(refl).*n_factor(refl).*exp(-i.*k(refl).*...
        f(refl))/2).*(-2*i*int_01_r.*cos(theta(refl)));
    E_z(refl) = E_z2+E_z2r;
end

end

function E_x = modeazix_subs(x, y, z, omega, w0, f, alphamax, z0,...
    n_subs, n1, n2)
% Source code by Harri Mäntylä. Code is based on Novotny's book on
% Nano-optics, chapter 3. This gives the x-component of focused azimuthal
% beam propagating to z-direction. This is with
% substrate. The final equation for reflected and transmitted field are not
% given in Novotny's book. They are derived from 3.85 and 3.86.
% x, y, z: spatial coordinates,
% omega: angular frequency,
% w0: beam waist radius which is the same in Novotny's book.
% f: focal length of the pulse,
% alphamax: greatest possible angle of refracted
% beam wrt the optical axis. It is denoted by theta_max in Novotny's book.
% n1: index of refraction before the lens
% n2: index of refraction after the lens. They are denoted by the same
% symbols in Novotny's book.
% z0: place of the substrate wrt the focus.
% n_subs: index of refraction of substrate.

E_x = zeros(size(x));

% E0 is assumed to be 1.

n_factor = sqrt(n1./n2);
sin_amax = sin(alphamax);

% This is the filling factor given by eq. 3.55 in Novotny's book.
f_factor = w0./(f.*sin_amax);

% This is the wave number after the lens.
k = k_number(omega, n2);

```

```

[theta, r] = cart2pol(x, y);

% when z is bigger than the z0 it means that the point we are
% considering, is inside
% the substrate. Then the function returns the transmitted field in
% that point.

trans=find(z>z0);
if ~isempty(trans)
    % The following are based on integrals of 3.58 and 3.60. The
    % difference is that eq. 3.83 is replaced with 3.88. and 3.84 is
    % replaced with 3.86

    int_11_t = I_11_t(f_factor(trans), sin_amax(trans), k(trans),...
        r(trans), z(trans), n2(trans), n_subs(trans), z0(trans));
    int_12_t = I_12_t(f_factor(trans), sin_amax(trans), k(trans),...
        r(trans), z(trans), n2(trans), n_subs(trans), z0(trans));
    E_x2t = (i.*k(trans).*n_factor(trans).*...
        (f(trans).^2)./(2.*w0(trans))).*exp(-i.*k(trans).*f(trans)).*...
        (i.*(int_11_t+3.*int_12_t).*sin(theta(trans))));
    E_x(trans) = E_x2t;
end

% Otherwise we are considering a point in the air. Then the total field
% is the sum of incident and reflected electric fields.

% The following are based on integrals of 3.58 and 3.60. The
% difference is that eq. 3.83 is replaced with 3.87. and 3.84 is
% replaced with 3.85.

refl=find(z<=z0);

if ~isempty(refl)
    int_11 = I_11(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl),...
        r(refl), z(refl));
    int_12 = I_12(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl),...
        r(refl), z(refl));
    int_11_r = I_11_r(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl),...
        r(refl), z(refl), n2(refl), n_subs(refl), z0(refl));
    int_12_r = I_12_r(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl),...
        r(refl), z(refl), n2(refl), n_subs(refl), z0(refl));
    E_x2 = (i.*k(refl).*n_factor(refl).*(f(refl).^2)./(2.*w0(refl))).*...
        exp(-i.*k(refl).*f(refl)).*...
        (i.*(int_11+3.*int_12).*sin(theta(refl))));
    E_x2r = (i.*k(refl).*n_factor(refl).*(f(refl).^2)./(2.*w0(refl))).*...
        exp(-i.*k(refl).*f(refl)).*...
        (i.*(int_11_r+3.*int_12_r).*sin(theta(refl))));

```

```

    E_x( refl ) = E_x2+E_x2r;
end

end

function E_y = modeaziy_subs(x, y, z, omega, w0, f, alphamax, z0,...
    n_subs, n1, n2)
% Source code by Harri Mäntylä. Code is based on Novotny's book on
% Nano-optics, chapter 3. This gives the y-component of focused azimuthal
% beam propagating to z-direction. This is with
% substrate. The final equation for reflected and transmitted field are not
% given in Novotny's book. They are derived from 3.85 and 3.86.
% x, y, z are spatial coordinates, omega is the angular frequency, w0 is
% the beam waist radius which is the same in Novotny's book. f is the focal
% length of the pulse, alphamax is the greatest possible angle of refracted
% beam wrt. to the optical axis. It is denoted by theta_max in Novotny's
% book.
% n1 is the index of refraction before the lens, n2 is the index of
% refraction after the lens. They are denoted by the same symbols in
% Novotny's book. z0 is the place of the substrate wrt the focus. n_subs
% is the index of refraction of substrate.

E_y = zeros(size(x));

% E0 is assumed to be 1.

n_factor = sqrt(n1./n2);
sin_amax = sin(alphamax);

% This is the filling factor given by eq. 3.55 in Novotny's book.

f_factor = w0./(f.*sin_amax);

% This is the wave number after the lens.

k = k_number(omega, n2);
[theta, r] = cart2pol(x, y);

% when z is bigger than the z0 it means that the point we are
% considering, is inside the substrate. Then the function returns
% the transmitted field in that point.

trans=find(z>z0);
if ~isempty(trans)

```

```

% The following are based on integrals of 3.58 and 3.60. The
% difference is that eq. 3.83 is replaced with 3.88. and 3.84 is
% replaced with 3.86

int_11_t = I_11_t(f_factor(trans), sin_amax(trans), k(trans),...
    r(trans), z(trans), n2(trans), n_subs(trans), z0(trans));
int_12_t = I_12_t(f_factor(trans), sin_amax(trans), k(trans),...
    r(trans), z(trans), n2(trans), n_subs(trans), z0(trans));
E_y2t = (i.*k(trans).*n_factor(trans).*.
    (f(trans).^2./(2.*w0(trans))).*...
    exp(-i.*k(trans).*f(trans)).*(-i.*(int_11_t+3.*int_12_t).*...
    cos(theta(trans))));
E_y(trans) = E_y2t;
end

% Otherwise we are considering a point in the air. Then the total field
% is the sum of incident and refracted electric fields.

% The following are based on integrals of 3.58 and 3.60. The
% difference is that eq. 3.83 is replaced with 3.87. and 3.84 is
% replaced with 3.85.

refl=find(z<=z0);

if ~isempty(refl)
    int_11 = I_11(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl),...
        r(refl), z(refl));
    int_12 = I_12(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl),...
        r(refl), z(refl));
    int_11_r = I_11_r(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl),...
        r(refl), z(refl), n2(refl), n_subs(refl), z0(refl));
    int_12_r = I_12_r(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl),...
        r(refl), z(refl), n2(refl), n_subs(refl), z0(refl));
    E_y2 = (i.*k(refl).*n_factor(refl).*(f(refl).^2./(2.*w0(refl))).*...
        exp(-i.*k(refl).*f(refl)).*(-i.*...
        (int_11+3.*int_12).*cos(theta(refl))));
    E_y2r = (i.*k(refl).*n_factor(refl).*(f(refl).^2./(2.*w0(refl))).*...
        exp(-i.*k(refl).*f(refl)).*...
        (-i.*(int_11_r+3.*int_12_r).*cos(theta(refl))));
    E_y(refl) = E_y2+E_y2r;
end

end

function E_x = moderadx_subs(x, y, z, omega, w0, f, alphamax, z0,...

```



```

    n_subs, n1, n2)
% Source code by Harri Mäntylä. Code is based on Novotny's book on
% Nano-optics, chapter 3. This gives the x-component of focused radial
% beam propagating to z-direction. This is with
% substrate. The final equation for reflected and transmitted field are not
% given in Novotny's book. They are derived from 3.85 and 3.86.
% x, y, z: spatial coordinates,
% omega: angular frequency,
% w0: beam waist radius which is the same in Novotny's book.
% f: focal length of the pulse,
% alphamax: greatest possible angle of refracted
% beam wrt the optical axis. It is denoted by theta_max in Novotny's book.
% n1: index of refraction before the lens
% n2: index of refraction after the lens. They are denoted by the same symbols in
% Novotny's book.
% z0: place of the substrate wrt the focus.
% n_subs: index of refraction of substrate.

E_x = zeros(size(x));

% E0 is assumed to be 1.

n_factor = sqrt(n1./n2);
sin_amax = sin(alphamax);

% This is the filling factor given by eq. 3.55 in Novotny's book.
f_factor = w0./(f.*sin_amax);

% This is the wave number after the lens.
k = k_number(omega, n2);
[theta, r] = cart2pol(x, y);

% when z is bigger than the z0 it means that the point we are considering,
% is inside the substrate. Then the function returns the transmitted
% field in that point.

trans=find(z>z0);
if ~isempty(trans)

% The following are based on integrals of 3.58 and 3.60. The
% difference is that eq. 3.83 is replaced with 3.88. and 3.84 is
% replaced with 3.86

int_ll_t = I_ll_t(f_factor(trans), sin_amax(trans), k(trans),...
    r(trans), z(trans), n2(trans), n_subs(trans), z0(trans));

```

```

int_12_t = I_12_t(f_factor(trans), sin_amax(trans), k(trans),...
    r(trans), z(trans), n2(trans), n_subs(trans), z0(trans));
E_x2t = (i.*k(trans).*n_factor(trans).*(f(trans).^2)./(2.*w0(trans))).*...
    exp(-i.*k(trans).*f(trans)).*...
    (i*(int_11_t-int_12_t).*cos(theta(trans)));
E_x(trans) = E_x2t;
end

% Otherwise we are considering a point in the air. Then the total field
% is the sum of incident and reflected electric fields.

% The following are based on integrals of 3.58 and 3.60. The
% difference is that eq. 3.83 is replaced with 3.87. and 3.84 is
% replaced with 3.85.

refl=find(z<=z0);

if ~isempty(refl)
    int_11 = I_11(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl),...
        r(refl), z(refl));
    int_12 = I_12(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl),...
        r(refl), z(refl));
    int_11_r = I_11_r(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl),...
        r(refl), z(refl), n2(refl), n_subs(refl), z0(refl));
    int_12_r = I_12_r(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl),...
        r(refl), z(refl), n2(refl), n_subs(refl), z0(refl));
    E_x2 = (i.*k(refl).*n_factor(refl).*(f(refl).^2)./(2.*w0(refl))).*...
        exp(-i.*k(refl).*f(refl)).*(i*(int_11-int_12).*cos(theta(refl)));
    E_x2r = (i.*k(refl).*n_factor(refl).*(f(refl).^2)./(2.*w0(refl))).*...
        exp(-i.*k(refl).*f(refl)).*...
        (i*(int_11_r-int_12_r).*cos(theta(refl)));
    E_x(refl) = E_x2+E_x2r;
end

end

function E_y = moderady_subs(x, y, z, omega, w0, f, alphamax, z0,...
    n_subs, n1, n2)
% Source code by Harri Mäntylä. Code is based on Novotny's book on
% Nano-optics, chapter 3. This gives the y-component of focused radial
% beam propagating to z-direction. This is with
% substrate. The final equation for reflected and transmitted field are not
% given in Novotny's book. They are derived from 3.85 and 3.86.
% x, y, z: spatial coordinates,
% omega: angular frequency,
% w0: beam waist radius which is the same in Novotny's book.

```

```

% f: focal length of the pulse,
% alphamax: greatest possible angle of refracted
% beam wrt the optical axis. It is denoted by theta_max in Novotny's book.
% n1: index of refraction before the lens
% n2: index of refraction after the lens. They are denoted by the same
% symbols in Novotny's book.

E_y = zeros(size(x));

% E0 is assumed to be 1.

n_factor = sqrt(n1./n2);
sin_amax = sin(alphamax);

% This is the filling factor given by eq. 3.55 in Novotny's book.
f_factor = w0./(f.*sin_amax);

% This is the wave number after the lens.
k = k_number(omega, n2);
[theta, r] = cart2pol(x, y);

% when z is bigger than the z0 it means that the point we are considering,
% is inside the substrate. Then the function returns the transmitted field in
% that point.
trans=find(z>z0);

% The following are based on integrals of 3.58 and 3.60. The
% difference is that eq. 3.83 is replaced with 3.88. and 3.84 is
% replaced with 3.86

if ~isempty(trans)

    int_11_t = I_11_t(f_factor(trans), sin_amax(trans), k(trans),...
        r(trans), z(trans), n2(trans), n_subs(trans), z0(trans));
    int_12_t = I_12_t(f_factor(trans), sin_amax(trans), k(trans),...
        r(trans), z(trans), n2(trans), n_subs(trans), z0(trans));
    E_y2t = (i.*k(trans).*n_factor(trans).*...
        (f(trans).^2)./(2.*w0(trans))).*exp(-i.*k(trans).*f(trans)).*...
        (i*(int_11_t-int_12_t).*sin(theta(trans))));
    E_y(trans) = E_y2t;
end

% Otherwise we are considering a point in the air. Then the total field
% is the sum of incident and reflected electric fields.

```

```

% The following are based on integrals of 3.58 and 3.60. The
% difference is that eq. 3.83 is replaced with 3.87. and 3.84 is
% replaced with 3.85.

refl=find(z<=z0);

if ~isempty(refl)
    int_11 = I_11(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl),...
        r(refl), z(refl));
    int_12 = I_12(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl),...
        r(refl), z(refl));
    int_11_r = I_11_r(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl),...
        r(refl), z(refl), n2(refl), n_subs(refl), z0(refl));
    int_12_r = I_12_r(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl),...
        r(refl), z(refl), n2(refl), n_subs(refl), z0(refl));
    E_y2 = (i.*k(refl).*n_factor(refl).*(f(refl).^2)./(2.*w0(refl))).*...
        exp(-i.*k(refl).*f(refl)).*(i*(int_11-int_12).*sin(theta(refl)));
    E_y2r = (i.*k(refl).*n_factor(refl).*(f(refl).^2)./(2.*w0(refl))).*...
        exp(-i.*k(refl).*f(refl)).*...
        (i*(int_11_r-int_12_r).*sin(theta(refl)));
    E_y(refl) = E_y2+E_y2r;
end
%     end
%
% end
end

function E_z = moderadz_subs(x, y, z, omega, w0, f, alphamax, z0,...
    n_subs, n1, n2)
% Source code by Harri Mäntylä. Code is based on Novotny's book on
% Nano-optics, chapter 3. This gives the z-component of focused radial
% beam prpagating to z-direction. This is with
% substrate. The final equation for reflected and transmitted field are not
% given in Novotny's book. They are derived from 3.85 and 3.86.
% x, y, z: spatial coordinates,
% omega: angular frequency,
% w0: beam waist radius which is the same in Novotny's book.
% f: focal length of the pulse,
% alphamax: greatest possible angle of refracted
% beam wrt the optical axis. It is denoted by theta_max in Novotny's book.
% n1: index of refraction before the lens
% n2: index of refraction after the lens. They are denoted by the same
% symbols in Novotny's book.
% z0: place of the substrate wrt the focus.
% n_subs: index of refraction of substrate.

```

```

E_z = zeros(size(x));

% E0 is assumed to be 1.

n_factor = sqrt(n1./n2);
sin_amax = sin(alphamax);

% This is the filling factor given by eq. 3.55 in Novotny's book.
f_factor = w0./(f.*sin_amax);

% This is the wave number after the lens.
k = k_number(omega, n2);
[theta, r] = cart2pol(x, y);

% when z is bigger than the z0 it means that the point we are considering,
% is inside the substrate. Then the function returns the transmitted
% field in that point.
trans=find(z>z0);

% The following are based on integrals of 3.58 and 3.60. The
% difference is that eq. 3.83 is replaced with 3.88. and 3.84 is
% replaced with 3.86

if ~isempty(trans)
    int_10_t = I_10_t(f_factor(trans), sin_amax(trans), k(trans),...
        r(trans), z(trans), n2(trans), n_subs(trans), z0(trans));
    E_z2t = (i.*k(trans).*n_factor(trans).*...
        (f(trans).^2)./(2.*w0(trans))).*...
        exp(-i.*k(trans).*f(trans)).*(-4.*int_10_t);
    E_z(trans) = E_z2t;
end

% Otherwise we are considering a point in the air. Then the total field
% is the sum of incident and reflected electric fields.

% The following are based on integrals of 3.58 and 3.60. The
% difference is that eq. 3.83 is replaced with 3.87. and 3.84 is
% replaced with 3.85.

refl=find(z<=z0);

if ~isempty(refl)
    int_10 = I_10(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl),...
        r(refl), z(refl));
    int_10_r = I_10_r(f_factor(refl), sin_amax(refl), k(refl),...
        r(refl), z(refl), n2(refl), n_subs(refl), z0(refl));

```

```
E_z2 = (i.*k(refl).*n_factor(refl).*(f(refl).^2)./(2.*w0(refl))).*...  
        exp(-i.*k(refl).*f(refl)).*(-4.*int_10);  
E_z2r = (i.*k(refl).*n_factor(refl).*(f(refl).^2)./(2.*w0(refl))).*...  
        exp(-i.*k(refl).*f(refl)).*(-4.*int_10_r);  
E_z(refl) = E_z2+E_z2r;  
end  
end
```